

**ZUR MESSUNG VON COMPTONPROFILEN
DURCH INELASTISCHE
PROTON-ELEKTRON STREUUNG**

Dissertation der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von

Hans Böckl

aus München

München, 17. 1. 1985

Zur MESSUNG VON COMPTONPROFILIEN DURCH

INELASTISCHE PROTON-ELEKTRON STREUUNG

DISSERTATION DER FAKULTÄT FÜR PHYSIK

DER LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

VORGELEGT VON

HANS BÖCKL

AUS MÜNCHEN

1. Gutachter: Prof. Dr. F. Bell

2. Gutachter: Prof. Dr. J. Peisl

Tag der mündlichen Prüfung: 12. Juni 1985

ZUSAMMENFASSUNG

Es wurde zum ersten Mal die Möglichkeit untersucht, neben Comptonstreuung und inelastischer Elektronenstreuung auch Ion-Elektron Streuung zur Messung von Comptonprofilen, d.h. projizierten Impulsverteilungen gebundener Elektronen, einzusetzen. Die Ion-Elektron Streuung besitzt gegenüber der Comptonstreuung den Vorteil großer Wirkungsquerschnitte und ist viel weniger empfindlich gegen Mehrfachstreuung als die inelastische Elektronenstreuung.

In dieser Arbeit werden energie- und winkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte von Elektronen aus der Streuung von 22 MeV Protonen an verschiedenen Festkörpertargets mit einem dazu entwickelten doppeltfokussierenden Spektrometer gemessen und im Rahmen einer Impulsnäherung mit Comptonprofilen verglichen. Der Vergleich der Messungen mit der Theorie zeigt Diskrepanzen, die weitgehend auf elastische Mehrfachstreuung der Elektronen in den Targets zurückgeführt werden können. Dazu wurde eine Mehrfachstreutheorie entwickelt, die in erster Näherung eine Korrektur der experimentellen Daten für diesen Effekt erlaubt. Trotzdem wird die Auswahl der Targets und die Meßgenauigkeit dadurch eingeschränkt. Die in dieser Arbeit erreichte Meßgenauigkeit und Energieauflösung reichten nicht aus, um damit Festkörpermodelle testen zu können, wohl aber, um ein Festkörper-Valenzcomptonprofil klar von dem atomaren Comptonprofil desselben Elements zu unterscheiden.

Ferner wurde gezeigt, daß auch Wirkungsquerschnitte von Projektilelektronen, die an Atomen gestreut werden, im Rahmen einer Impulsnäherung durch Comptonprofile beschrieben werden können. Da die Projektilionen in den verschiedensten Ionisations- und Anregungszuständen verfügbar sind, ist ein detaillierter Einblick in die Elektronenstruktur einzelner Schalen möglich.

1. EINLEITUNG	1
2. THEORIE DER COMPTONPROFILE	3
2.1 Verschiedene Verfahren, Comptonprofile zu messen	3
2.2 Impulsnäherung für Ion-Elektron Streuung	6
2.2.1 Kinematik	8
2.2.2 Wirkungsquerschnitte	9
2.2.3 Comptonprofile	10
2.2.4 Transformation ins Projektilsystem	15
2.3 Bornsche Näherung	20
2.3.1 Vergleich mit der Impulsnäherung	24
3. EXPERIMENT UND AUSWERTUNG	31
3.1 Meßanordnung	31
3.2 Elektronenspektrometer	32
3.2.1 Aufbau des Spektrometers	32
3.2.2 Magnetoptik	36
3.2.3 Feldverlauf	38
3.2.4 Energie- und Winkelauflösung	40
3.3 Messung und Auswertung	41
4. ERGEBNISSE	45
4.1 Atomare Comptonprofile	45
4.1.1 Das binäre Stoßmaximum für Targetelektronen	45
4.1.2 Das binäre Stoßmaximum für Projektilelektronen	51
4.2 Festkörpercomptonprofile	54
4.3 Elastische Elektronenstreuung	60
4.3.1 Qualitative Betrachtungen	60
4.3.2 Wirkungsquerschnitte für Einfachstreuung	61
4.3.3 Mehrfachstreuung und Korrektur	63
4.4 Bornsche Näherung für K- und L- Schale	75
5. DISKUSSION	78
LITERATURVERZEICHNIS	80
HÄUFIG VERWENDETE ABKÜRZUNGEN	83

1. EINLEITUNG

Wenige Jahre nach Entdeckung des Comptoneffektes 1923 zeigte sich, daß die Breite der Comptonstreuulinie nicht experimentell begründet war, sondern auf eine Art Dopplerverbreiterung infolge der Bewegung des streuenden, gebundenen Elektrons zurückzuführen ist (DM29). Die Linienform wird durch die auf den Streuvektor projizierte Impulsdichte, das Comptonprofil, bestimmt. In neuerer Zeit kamen weitere Verfahren zur Messung von Comptonprofilen hinzu: inelastische Elektronenstreuung, Winkelkorrelation bei Positron-Annihilation und strahlender Elektroneneinfang (WI77, SP79, WT83). Die Comptonstreuung und die inelastische Elektronenstreuung haben inzwischen eine beachtliche Genauigkeit erreicht, die eine detaillierte Erforschung der Elektronenstruktur von Festkörpern und Gasen erlaubt. Hierzu trugen in letzter Zeit insbesondere Anisotropiemessungen, d.h. Messungen von Comptonprofilen in verschiedenen Kristallsymmetrierichtungen, bei (ER74, MT69, PR76). Die Anwendbarkeit der Comptonstreuung ist jedoch wegen der starken Zunahme des Wirkungsquerschnitts für Photoeffekt und Rayleighstreuung mit zunehmender Kernladungszahl Z auf $Z < 40$ beschränkt, die inelastische Elektronenstreuung erlaubt die Messung von Comptonprofilen wegen Vielfachstreuung im wesentlichen nur bei Gasen.

Wie seit langem bekannt ist, weist das Energiespektrum der durch schnellen Ionenstoß in Vorwärtsrichtung aus dünnen Folien herausgeschlagenen Elektronen bei einer Energie, die der doppelten Projektilgeschwindigkeit entspricht, ein breites Maximum auf, das binäre Stoßmaximum (BSM). In dieser Arbeit soll gezeigt werden, daß durch Elektronenspektroskopie im Bereich des BSM Comptonprofile gemessen werden können. Dazu wurden am Münchner Tandembeschleuniger Experimente mit 22 MeV Protonen und verschiedenen Targets (C, Al, Ti, Cu, Ag) durchgeführt. Es wurde ein Elektronenspektrometer entwickelt, das die Messung energie- und winkeldifferentieller Wirkungsquerschnitte für Elektronen im Bereich des BSM ermöglicht. Es wird untersucht, inwieweit die inelastische Proton - Elektron Streuung eine Konkurrenz

für andere Verfahren zur Messung von Comptonprofilen darstellen kann.

Diese Arbeit gliedert sich wie folgt: Zunächst werden im 2. Kapitel verschiedene Theorien für die Ionisation durch Ionenstoß dargelegt. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Impulsnäherung, die einen direkten Zusammenhang zwischen der Linienform des BSM und dem Comptonprofil der gebundenen Elektronen angibt. Das 3. Kapitel beschreibt das Elektronenspektrometer, den experimentellen Aufbau und Verfahren zur Auswertung der gemessenen Spektren. Das 4. Kapitel gibt einen Vergleich zwischen experimentellen Wirkungsquerschnitten und theoretischen im Rahmen der Impulsnäherung. Da sich in einigen Fällen Diskrepanzen ergeben, die teilweise auf elastische Mehrfachstreuung der Elektronen in den Targets zurückzuführen sind, wird ein Verfahren zur Korrektur der experimentellen Daten für diesen Effekt entwickelt. Schließlich werden im 5. Kapitel Vorteile und Probleme der inelastischen Proton - Elektron Streuung zur Messung von Comptonprofilen diskutiert.

Es werden durchgehend atomare Einheiten verwendet.

2. THEORIE DER COMPTONPROFILE

2.1 Verschiedene Arten, Comptonprofile zu messen

a) Comptonstreuung

Bei der Comptonstreuung an einem gebundenen Elektron kann dieses unter der Voraussetzung, daß die Bindungsenergie wesentlich kleiner als der Energietransfer ist, als quasifrei angesehen werden: Die Dauer der Wechselwirkung ist zu klein, um die potentielle Energie des Elektrons wesentlich zu ändern; das Potential des Kerns tritt nur als Lieferant einer Impulswellenfunktion in Erscheinung. Die verschiedenen möglichen Elektronenimpulse führen zu einer Verbreiterung des Linienprofils. Der energie- und winkeldifferentielle Wirkungsquerschnitt der Comptonstreuung am gebundenen Elektron läßt sich somit folgendermaßen schreiben (EI70).

$$(1) \quad \frac{d^2\sigma}{dE \, d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Th} \frac{E_1}{E_2 q} J(p_z)$$

$$(2) \quad J(p_z) = \int |\Psi(\vec{p})|^2 \, dp_x \, dp_y$$

$$(3) \quad p_z = (E_1 - E_2 - q^2/2)/q$$

Hierbei bedeuten E_1, E_2 die Energie des Photons vor, bzw. nach dem Stoß und q den Impulsübertrag. Der 1. Faktor in Gl.1 (Thomsonquerschnitt) gibt die Wahrscheinlichkeit, daß das Photon den Energieverlust $E_1 - E_2$ erleidet und in das Raumwinkelement $d\Omega$ gestreut wird; der letzte Faktor, das Comptonprofil, die Wahrscheinlichkeit, daß das Elektron den durch die Kinematik festgelegten Impuls hatte. Da Energie- und Impulserhaltungssatz nur die Komponente p_z des intrinsischen Impulses parallel zum Streuvektor festlegen, wird die Impulsdichte über eine Ebene senkrecht zum Streuvektor integriert (Gl.2).

Gl.(1) wird als Impulsnäherung bezeichnet und gilt analog

auch bei allen anderen Verfahren zur Messung von Comptonprofilen, bei der Elektron-Elektron Streuung und der Elektron-Positron Paarvernichtung allerdings nur eingeschränkt. Die Impulsnäherung der Comptonstreuung kann auch aus Grenzfall einer Formfaktornäherung angesehen werden (SS75).

Die Comptonstreuung hat sich bei der Messung von Comptonprofilen vor allem an Festkörpern mit Kernladungszahlen $Z \leq 40$ bewährt, bei größeren Z werden Absorption und Rayleighstreuung dominierend. Die Meßergebnisse müssen im allgemeinen für Auflösung des Detektors und Vielfachstreuung korrigiert werden (WT83).

b) Elektron-Elektron Streuung

Wegen der Ununterscheidbarkeit des Projektil- und des gestreuten Elektrons ist die Impulsnäherung bei der inelastischen Elektron-Elektron Streuung im allgemeinen nicht anwendbar. Untersucht man jedoch nur Elektronen, die annähernd in Vorwärtsrichtung emittiert werden (das sind dann vorwiegend Projektilelektronen), so wird die Austauschkorrektur klein und annähernd unabhängig vom intrinsischen Impuls. Somit ist eine Faktorisierung des Wirkungsquerschnitts in den für freie Elektronen und das Comptonprofil wie bei der Comptonstreuung möglich (BT83, WL75). Der Wirkungsquerschnitt für freie Elektronen kann als Produkt des Rutherfordquerschnitts und einer Austauschkorrektur geschrieben werden:

$$(4) \quad \frac{d\sigma}{dQ} = \frac{4}{q^4} \left(1 - \frac{q^2}{v^2} + \frac{q^4}{v^4} \right)$$

$$q = v \sin \theta$$

Hier ist v die Projektilgeschwindigkeit vor dem Stoß und θ der Streuwinkel. Der Wirkungsquerschnitt hängt bei den kleinen Streuwinkeln, bei denen die Impulsnäherung gültig ist, sehr stark von θ ab; die Messungen werden damit durch Vielfachstreuung im Target erheblich verfälscht. Aus diesem

Grund wurde die Elektron-Elektron Streuung zur Messung von Comptonprofilen fast ausschließlich auf Gase angewandt. Die Kinematik ist dieselbe wie bei der Comptonstreuung (Gl.3). Man kann auch das Primärelektron und das gestreute Elektron in Koinzidenz spektroskopieren ($e, 2e$ - Messungen), die Ununterscheidbarkeit entfällt dann. Die Kinematik dieser Meßmethode legt außerdem sämtliche Komponenten des intrinsischen Impulses fest, die Wirkungsquerschnitte sind also proportional direkt zur Impulsdichte. Ferner kann die Impulsdichte separat für verschiedene Schalen gemessen werden (HC73). Die Koinzidenzmessung bringt aber auch eine erhebliche Einbuße an Zählrate mit sich.

c) Winkelkorrelation bei der Elektron-Positron Annihilation
 Beschleßt man ein Festkörpertarget mit Positronen, so werden diese durch Ionisation auf thermische Geschwindigkeiten abgebremst und annihilieren dann direkt oder nach Bildung eines Positroniums unter Emission meist zweier Photonen. Da sowohl Positron als auch Elektron vor der Zerstrahlung in Bewegung sind, weicht der Winkel θ zwischen den beiden Emissionsrichtungen etwas von 180° ab. Die Abweichung ist proportional zum Gesamtimpuls von Positron und Elektron (ST57). Die koinzidente Photonenintensität als Funktion von θ spiegelt daher die Impulsverteilung des Systems Elektron-Positron wieder. Gewöhnlich wird nur eine Komponente der Emissionsrichtungen und damit eine Komponente des Gesamtimpulses festgelegt, man mißt dann das Comptonprofil des Systems (long-slit-Anordnung). Mehr Information liefert das crossed-slit Verfahren, das zwei Komponenten festlegt und die Projektion der Impulsverteilung auf die Verbindungslinie beider Schlitze bestimmt (FS66, SI74). Der Einfluß des Positrons erschwert die quantitative Bestimmung von Elektronen-Comptonprofilen nach dieser Methode, ist in einigen Fällen aber auch von Vorteil: da das Positron vom Kern abgestoßen wird, annihiliert es vorwiegend mit Valenzelektronen; dadurch und wegen der hohen Auflösung dieser Methode können z.B. Details von Fermiflächen gut wiedergegeben werden (FS66).

d) strahlender Elektroneneinfang

Diese Methode zur Messung von Comptonprofilen machte erstmals von Schwerionen Gebrauch. Ein Targetelektron wird von einem hochionisierten Ion (z.B. S^{16+}) unter Emission eines Photons mit der Energie E eingefangen. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozeß in Abhängigkeit von der Photonenenergie ergibt sich im Rahmen der Impulsnäherung (SP79) als Produkt des Querschnitts für den Einfang eines freien Elektrons und dem Comptonprofil des Targetelektrons. Der intrinsische Impuls wird hier auf die Projektilgeschwindigkeit $\vec{v}$ projiziert und hängt von der Bindungsenergie E_b^P des Targetelektrons und von der Bindungsenergie E_b^T des Projektilelektrons nach dem Einfang ab (Gl.5).

$$(5) \quad p_z = (E - v^2/2 + E_b^T - E_b^P) / v$$

Da sich die Ladung des Ions und somit auch E_b^P beim Durchgang durch das Target ändern kann, erhält man mit dieser Methode im allgemeinen eine Überlagerung mehrerer Comptonprofile. Dies ist nur durch Verwendung sehr dünner Targets und hoher Projektilenergien zu vermeiden.

2.2 Impulsnäherung für Ion-Elektron Streuung

Betrachtet man die Streuung eines Ions der Masse M an einem freien, im Targetsystem ruhenden Elektron im Ruhesystem des Ions, so bleibt wegen $M \gg 1$ der Betrag der Geschwindigkeit des Elektrons konstant. Der Geschwindigkeitsvektor des gestreuten Elektrons im Laborsystem liegt demnach auf einem Kreis mit Radius v mit um v verschobenem Mittelpunkt. In Abb.1 sind die Geschwindigkeitskomponenten des gestreuten Elektrons parallel ($v_{\parallel}$) und senkrecht ($v_{\perp}$) zu v aufgetragen. Hieraus ergibt sich bei nichtrelativistischer Rechnung die energetische Lage $E_{\max}$ des BSM für den Winkel θ_e zwischen Projektil und gestreutem Elektron :

$$(6) \quad E_{\max} = 2 v^2 \cos^2 \theta_e$$

Bei der Ionenstreuung an gebundenen Elektronen wird durch deren Impulsverteilung Gleichung (6) modifiziert, im Energiespektrum der emittierten Elektronen erscheint also, analog zur Comptonstreuung und zur Elektron-Elektron Streuung, eine verbreiterte Linie, die das Comptonprofil der gebundenen Elektronen widerspiegelt. Da hier aber nicht die Primärteilchen, sondern die Targetelektronen spektroskopiert werden und wegen $M \gg 1$ ergeben sich einige wesentliche Unterschiede zu den erwähnten Verfahren.

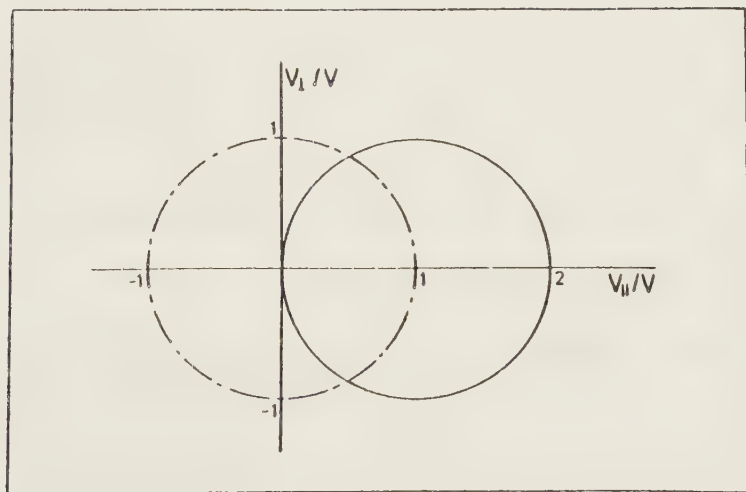


Abb.1 Kinematik der Ion-Elektron Streuung
gestrichelt: im Projektilsystem
durchgezogen: im Laborsystem

2.2.1 Kinematik

Aus Energie- und Impulserhaltungssatz folgt unter Berücksichtigung von M 1

$$(7) \quad E + E_b = (\vec{k} - \vec{p}_1) \cdot \vec{v}$$

Dabei ist E_b der Betrag der Bindungsenergie des Elektrons, $\vec{p}_1$ der Elektronenimpuls vor dem Stoß und $\vec{k}$ der Impuls nach dem Stoß. Daraus folgt

$$(8) \quad p_z = k \cos \theta_e - (E + E_b)/v$$

Im Gegensatz zur Comptonstreuung und zur Elektron-Elektron Streuung wird $\vec{p}_1$ hier auf die Projektilgeschwindigkeit projiziert, da nicht das Projektil, sondern das Sekundärelektron betrachtet wird. Aus demselben Grund hängt p_z hier auch von der Bindungsenergie E_b der Targetelektronen ab. Das BSM ($p_z = 0$) wird dadurch zu kleineren Energien verschoben:

$$(9) \quad E_{\max} = 2 v^2 \cos^2 \theta_e - 2 E_b$$

Gleichung (9) gilt unter der Voraussetzung $E_b \ll E$. Es ergibt sich somit eine unterschiedliche Verschiebung der Beiträge der einzelnen Schalen und daher eine Asymmetrie des BSM. Die Asymmetrie nimmt mit kleinerer Projektilgeschwindigkeit zu. Die Nichtlinearität der Gleichung (8) - p_z hängt von Energie und Impuls des Elektrons ab - führt zu einer leichten Verzerrung der Energieskala, für $E \ll E_{\max}$ sogar zu einer Zweideutigkeit der Funktion $E(p_z)$. Der niederenergetische Zweig der Funktion ist aber bedeutungslos, da für diesen die Impulsnäherung nicht mehr gilt.

Bei relativistischer Rechnung behält Gleichung (8) ihre Gültigkeit, die Position des BSM ändert sich jedoch zu

$$(10) \quad E_{\max} = (2 v^2 \cos^2 \theta_e - 2 E_b) / (1 - \frac{v^2}{c^2} \cos^2 \theta_e)$$

c ist die Lichtgeschwindigkeit. Für Protonen mit $E_p = 22$ MeV als Primärteilchen ergibt die relativistische Rechnung eine Verschiebung von 0.5 keV bei $E_{\max} = 48$ keV und eine Verbreiterung des BSM um 3%.

Differenzieren der Gleichung (8) bei festem $p_z = 0, E_p = 0$ ergibt

$$(11) \quad \Delta p_z = v_e \cos \theta_e \cdot \Delta k/k$$

v_e ist die Geschwindigkeit des Elektrons. Die Gl. 11 gilt auch bei relativistischer Rechnung. Die relative Breite des BSM nimmt mit zunehmender Projektilgeschwindigkeit also ab und das BSM tritt deutlicher in Erscheinung. Für eine gegebene intrinsische Impulsauflösung Δp_z erfordert Erhöhung der Projektilgeschwindigkeit damit eine Verbesserung der Impulsauflösung $\Delta k/k$ eines Elektronenspektrometers.

2.2.2 Wirkungsquerschnitte

Die Streuung der freien Elektronen am Ion mit der Kernladungszahl Z , wird unter Vernachlässigung relativistischer Effekte durch die ins Laborsystem transformierte Rutherford-Streuformel beschrieben:

$$(12) \quad \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_e} \right)_L = \frac{8 Z^2 p^2}{v} k^{-3}$$

Der zweifach differentielle Wirkungsquerschnitt für Elektronenemission durch Ionenstoß läßt sich damit in der Impulsnäherung wie folgt angeben (CT82, BB83)

$$(13) \quad \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega_e} = \frac{1}{2v} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_e} \right)_L J(p_z)$$

Der Faktor $1/2v$ ergibt sich aus der Umrechnung des intrinsischen Impulsintervalls dp_z in das Energieintervall

dE. Die Impulsnäherung setzt wie bei der Comptonstreuung $E_p \ll E$ voraus.

Die Energieabhängigkeit des Rutherfordquerschnitts im Bereich des BSM verstärkt die durch verschiedene Bindungsenergien verursachte Asymmetrie des BSM: Die Querschnitte sind auf der niederenergetischen Seite des BSM größer als auf der hochenergetischen. Auch dieser Asymmetriebeitrag nimmt mit sinkender Projektilgeschwindigkeit zu, da dann auch nach Gl. 11 die relative Breite des BSM größer wird. Die steigende Asymmetrie hat zur Folge, daß für hinreichend kleine Projektilgeschwindigkeiten das BSM schließlich verschwindet. Dies wird in Abb. 2 deutlich, wo zweifach differentielle experimentelle Wirkungsquerschnitte für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten (RM74) dargestellt sind.

Bei relativistischer Rechnung ist der Rutherfordquerschnitt durch den Mott-Querschnitt zu ersetzen. Dies ergibt unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung ($Z_p \ll 137$) einen Korrekturfaktor (BB83)

$$(1 - \beta^2) (1 - \beta^2 \cos^2 \theta_e) \quad , \quad \beta = v/c$$

Dieser Faktor ist im Bereich des BSM aber annähernd konstant und kann bei Relativmessungen vernachlässigt werden.

2.2.3 Comptonprofile

In diesem Kapitel sollen Zusammenhänge zwischen Comptonprofilen und Wellenfunktionen illustriert und Methoden zu deren Berechnung angegeben werden. Für isotrope Wellenfunktionen (Corezustände) vereinfacht sich (2) zu

$$(14) \quad J(p_z) = 2\pi \int_{p_z}^{\infty} |\Psi(p)|^2 p \, dp$$

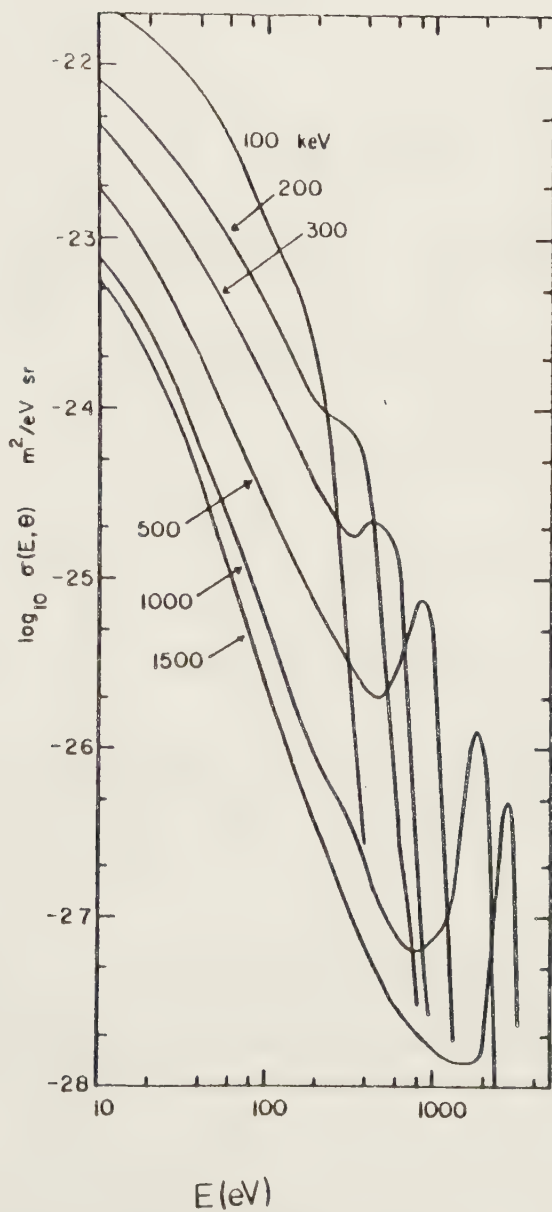


Abb.2 Experimentelle zweifach differentielle Wirkungsquerschnitte für $\text{H}^+ + \text{H}_2$ bei verschiedenen Projektilenergien (RM74)

Wegen der Normierung

$$(15) \int_{-\infty}^{\infty} J(p_z) dp_z = \text{Besetzungszahl}$$

sind zur Bestimmung von Comptonprofilen keine Absolutmessungen erforderlich. Die folgenden Beispiele für Comptonprofile in diesem Kapitel sind jeweils auf ein Elektron normiert. Für wasserstoffähnliche Impulswellenfunktionen mit Kernladungszahl Z (BS57) gilt:

$$(16) J_{nl}(p_z) = \frac{C_{nl}}{\pi Z} \sum_{k=1+3}^{2n+1} a_k^{nl} \left(n^2 \frac{p^2}{Z^2} + 1\right)^{-k}$$

Tabelle 1 : Koeffizienten a_k^{nl}

n	1/k	3	4	5	6	7	C_{nl}
1	0	1					8/3
2	0	5	-15	12			64/15
2	1		5	-4			64/15
3	0	315	-2520	7392	-8960	3840	8/35
3	1		21	-84	112	-48	64/7
3	2			21	-35	15	1024/175

Weitere Koeffizienten bis $n=5$ sind in (SS75) angegeben. In Abb. 3 sind einige wasserstoffähnliche Comptonprofile dargestellt. Die Plateaus bei den $2s, 3s, 3p$ - Comptonprofilen entsprechen den Radialknoten der zugehörigen Wellenfunktionen. Zunehmender Bahndrehimpuls l bewirkt eine Verbreiterung des Maximums und einen steileren Abfall nach hohen Impulsen. Diese Verbreiterung wird bei Elementen mit gefüllter d- bzw. f- Schale besonders deutlich. Es gilt mit geeignetem Parameter a

$$(17) J(p_z) = J(0) - a (p/Z)^{2l+2} \quad \text{für } p \ll Z$$

$$(18) J(p_z) \sim (p/Z)^{-2l-6} \quad \text{für } p \gg Z$$

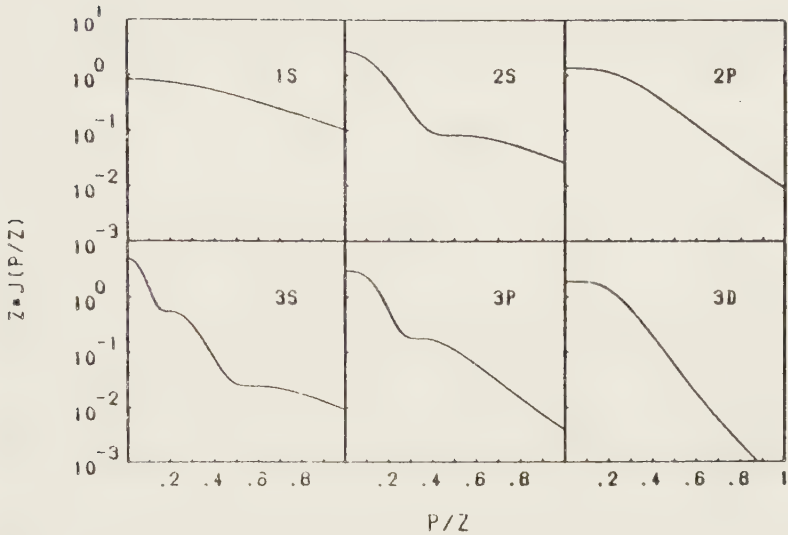


Abb.3 Wasserstoffähnliche Comptonprofile für $n=1,2,3$
 Die Diagramme sind bei der gewählten Skalierung
 unabhängig von Z

Bemerkenswert ist der Einfluß der magnetischen Quantenzahl m auf das Comptonprofil: Wenn $l + m$ ungerade ist, so besitzt die Wellenfunktion eine Knotenebene, die bei geeigneter Projektionsrichtung des Comptonprofils mit der Integrations-ebene in Gleichung (2) zusammenfällt mit der Folge $J(0) = 0$.

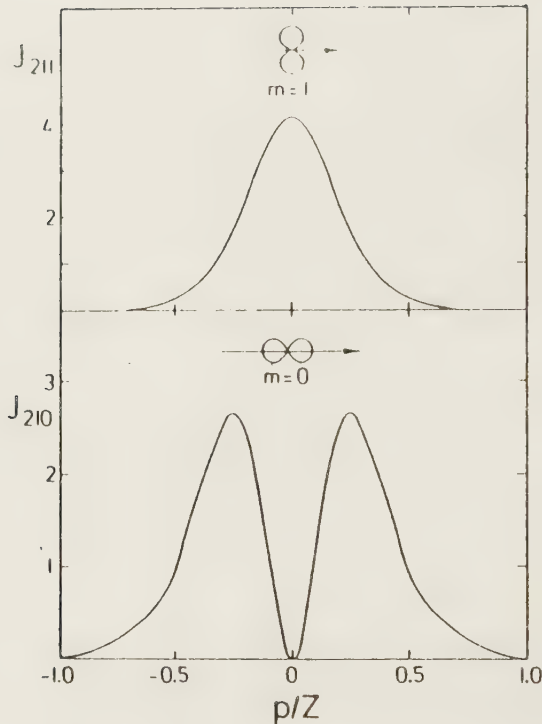


Abb.4 Wasserstoffähnliche Comptonprofile
für $2p, m=0$ und $2p, m=1$

Abb. 4 illustriert diesen Effekt am Beispiel des $2p, m=0$ und $2p, m=1$ - Niveaus. Die Quantisierungsachse steht senkrecht zur Integrationsebene.

In dieser Arbeit werden die Corezustände durch Hartree-Fock Comptonprofile beschrieben, die durch Fouriertransformation und Integration entsprechender Ortswellenfunktionen (CR74, PO77) gewonnen werden können (BM75). Die Valenzcomptonprofile wurden experimentellen Ergebnissen der Comptonstreuung entnommen (C:RE74, Al:PM74, Ti:FP76, Cu:ER74). Da für Silber keine Festkörpercomptonprofile verfügbar waren, wurden als einfachstes Modell die $5s$ - Valenzelektronen durch ein freies Elektronengas mit einer

Fermienergie $E_f = 5.48$ eV (KI83) und die 4d - Elektronen durch atomare Hartree-Fock Comptonprofile beschrieben. Bezeichnet man den Fermimpuls mit p_f , dann ergibt sich für das Comptonprofil eines freien Elektronengases folgender Ausdruck (DM29)

$$(19) \quad J(p_z) = \frac{3}{4} p_f^{-3} (p_f^2 - p_z^2)$$

Dies ist eine nach unten geöffnete Parabel mit der vollen Breite $2 p_f$. Die Messung des Comptonprofile von Beryllium, das in guter Näherung durch Gl.(19) beschrieben werden kann, durch DuMond 1929 ergab den ersten experimentellen Hinweis für die Theorie des freien Elektronengases. Festkörpercomptonprofile sind generell breiter als entsprechende atomare Comptonprofile, da die Festkörperwellenfunktionen im Ortsraum durch deren Periodizität stärker zusammengedrückt sind, was im Impulsraum zu einer Verbreiterung führt (vgl. Abb.44,45). Die Messung von Festkörpercomptonprofilen, insbesondere deren Anisotropie, d.h. die Differenz der Comptonprofile in verschiedenen Kristallsymmetrierichtungen, erlaubt bei hinreichender Genauigkeit einen Einblick in Bandstrukturen und die Struktur von Fermiflächen (PR76,FS66). Da jedoch solche Festkörpercomptonprofile gewöhnlich den atomaren Core-Profilen überlagert und die Asymmetrien sehr klein sind (einige Prozent), ist die erforderliche Meßgenauigkeit nur schwer zu erreichen.

2.2.4 Transformation ins Projektilsystem

Da vollständig ionisierte, schwere Ionen erst bei sehr hohen Beschleunigungsenergien verfügbar sind, emittiert bei der Streuung eines Ions an einem Atom häufig auch das Ion Elektronen. Anders als beim Targetatom kann der Ionisations- und Anregungsgrad des Ions in weiten Grenzen variiert

werden. Die Veränderung der Besetzungszahl einer Schale bei sonst gleicher Konfiguration ermöglicht auch schalen-spezifische Messungen. Die Ionisation von Projektil-elektronen durch Streuung am Targetkern ist der analoge Vorgang zum BSM im Projektilsystem (vgl. Abb. 1) und kann entsprechend auch durch eine Impulsnäherung beschrieben werden (JA80, BB831).

$$(20) \quad \frac{d^2 \epsilon}{dE d\Omega_e} = \frac{1}{v} \left(\frac{d\epsilon}{d\Omega_e} \right) J(p_z)$$

$$(21) \quad p_z = (v^2/2 - k^2/2 - E_b)/v$$

$$(22) \quad \left(\frac{d\epsilon}{d\Omega_e} \right) = \frac{4}{q^4} (Z-F(q))^2$$

Die Umrechnung von dp_z in dE ergibt hier einen Faktor $1/v$. Das Projektilektron wird elastisch am Targetatom gestreut; der Streuquerschnitt $(d\epsilon/d\Omega_e)$ für ein freies Elektron ergibt sich in Bornscher Näherung, indem man in der Rutherford-Streuformel Z durch $Z-F(q)$ ersetzt (LL79). $F(q)$ stellt dabei den kohärenten Atomformfaktor dar (CW74). Die Gültigkeit der Bornschen Näherung und eine geeignete Wahl für $F(q)$ sind Voraussetzung für die Extraktion von Comptonprofilen aus dem BSM für Projektilelektronen, da der Faktor $(Z-F(q))^2$ die Linienform beeinflusst.

Gemäß Gl.21 hängt auch die Position des BSM für Projektilelektronen von der Bindungsenergie der einzelnen Schalen ab. Da bei wachsendem Ionisationsgrad des Ions die Elektronen stärker gebunden werden, vergrößert sich auch die Verschiebung und die Linienbreite. Elastische Elektronenstreuung stellt hier im Gegensatz zum BSM für Targetelektronen kein Problem dar, denn p_z hängt nicht von θ_e ab. Die Elektronenstreuung verfälscht nur den Absolutwert der Wirkungsquerschnitte, nicht aber die Linienform.

Allgemein können bei der Streuung zweier Ionen (oder Atome), die jeweils noch Elektronen enthalten, 3 Prozesse zur

Ionisation durch Coulombwechselwirkung führen:

- Streuung von Projektilelektronen am Targetkern
- Streuung von Targetelektronen am Projektilkern
- Streuung von Projektilelektronen an Targetelektronen

Auch der 3. Prozeß läßt sich im Rahmen einer Impulsnäherung beschreiben, das Comptonprofil ist dabei durch eine Faltung der Comptonprofile der aneinander gestreuten Elektronen zu ersetzen. Die Faltung zweier wasserstoffähnlicher 1s - Comptonprofile (im Prinzip auch für andere Schalen) kann man analytisch berechnen mit dem Ergebnis :

$$(23) \quad J(p_z) = \frac{8}{3 \pi (Z+Z_p) (1+w^2)^{\frac{3}{2}}} (1+f(1-5w^2)+f^2(1-10w^2+5w^4))$$

$$f = \frac{Z \cdot Z_p}{(Z+Z_p)^2 (1+w^2)}$$

$$w = p_z / (Z+Z_p)$$

$$p_z = (k \cdot v \cdot \cos \theta_e - k^2) / q$$

Die Kinematik der drei Prozesse wird in Abb.5 veranschaulicht; der Kreis für den 3. Prozeß ist wegen der gleichen Massen von Projektil- und gestreutem Elektron um einen Faktor 2 kleiner. Ein an sich kompliziertes Mehrkörperproblem läßt sich so durch die Impulsnäherung bemerkenswert einfach beschreiben.

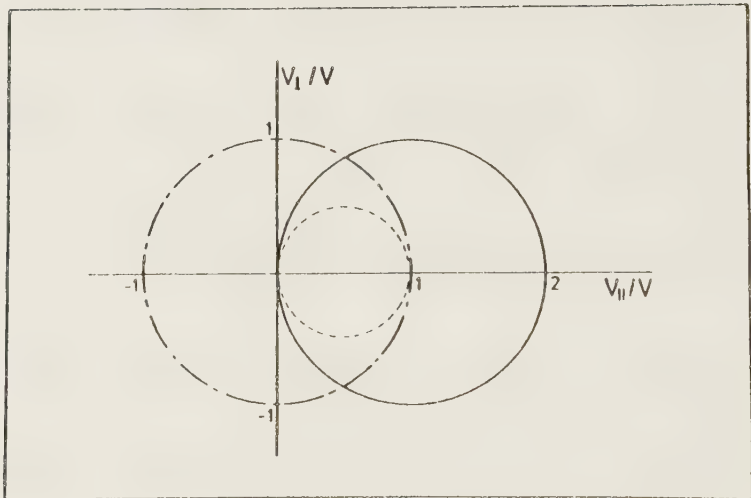


Abb.5 Kinematik der Streuung zweier Ionen. Der kleine Kreis repräsentiert die Streuung der Elektronen untereinander.

Das Zusammenwirken der 3 Prozesse soll nun noch in zwei Diagrammen verdeutlicht werden. In Abb.6 sind die Wirkungsquerschnitte in der Impulsnäherung mit wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen für alle 3 Prozesse dargestellt, die Einzelbeiträge sind gestrichelt, die Summe durchgezogen. Bei dem Elektronenwinkel $\theta_e = 40^\circ$ sind die 3 Maxima deutlich voneinander getrennt, das mit der niedrigsten Energie gehört zur Elektron-Elektron-Streuung und das mit der größten Energie ist das BSM für Targetelektronen.

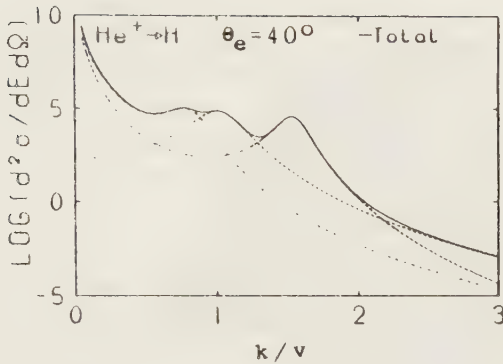


Abb.6 $\text{He}^+ + \text{H}$, $\theta_e = 40^\circ$

linkes Maximum: Elektron-Elektron-Streuung

mittleres Maximum: BSM für Projektilelektron

rechtes Maximum: BSM für Targetelektronen

Die Kinematik wird besonders deutlich bei einer zweidimensionalen Darstellung des Wirkungsquerschnittes in Abhängigkeit von der Geschwindigkeitskomponente des gestreuten Elektrons parallel ($v_{\parallel}$) und senkrecht ($v_{\perp}$) zur Projektilgeschwindigkeit. Abb.7 zeigt das System $\text{Ne} + \text{Ne}$ bei $v=20$, die Abschirmung des Targetkerns gegen Projektilelektronen wurde durch einen Thomas-Fermi-Parameter $\lambda = Z^{1/3}/0.88$ berücksichtigt (vgl. Abschnitt 4.1.2). Die beiden Kreise, die den Ort aller Maxima für Projektil- und Targetelektronen darstellen, sind offensichtlich. Man erkennt auch, daß die Wirkungsquerschnitte mit abnehmender Relativgeschwindigkeit zwischen gestreutem Elektron und Target, bzw. Projektil (cusp-peak) stark anwachsen, eine Folge der q -Abhängigkeit des Rutherfordquerschnitts. Vergleichbare Ergebnisse erhält man für hohe Projektilgeschwindigkeiten $v \gg Z$ auch bei einer genaueren Rechnung, bei der Wirkungsquerschnitte für die Emission von Projektilelektronen bei gleichzeitiger Anregung eines Targetelektrons bestimmt werden (DA81).

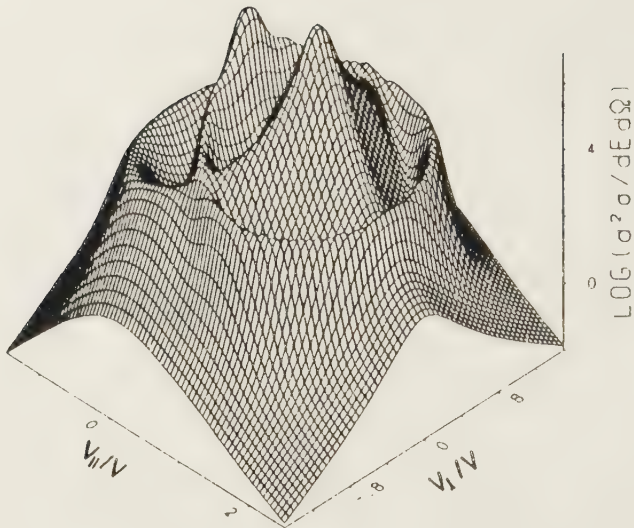


Abb.7 BSM für Projektil- und Targetelektronen
Wirkungsquerschnitt für $\text{Ne}+\text{Ne}$, $v=20$, $\lambda = 2.45$
in Abhängigkeit von der Geschwindigkeitskomponente
parallel ($v_{||}$) und senkrecht ($v_{\perp}$) zu v .

2.3 Bornsche Näherung

Für die Ionisation stark gebundener Elektronen und für Energien jenseits des BSM, d.h. nicht mehr $p_1 \ll k$ ist die Impulsnäherung nicht mehr anwendbar. Wenn $Z_p \ll Z$ (in dieser Arbeit $Z_p = 1$, $Z \geq 6$), so stellt die Wechselwirkung des Targetelektrons mit dem Projektilkern eine kleine Störung des Targetelektrons dar. Außerdem können Abbremsung und Ablenkung des Ions durch den Targetkern bei hohen Projektilgeschwindigkeiten vernachlässigt werden. Unter diesen Voraussetzungen ist eine 1. Bornsche Näherung zur

Berechnung der Ionisationsquerschnitte geeignet.

Die Anregungsamplitude a_{fi} für Coulombwechselwirkung zwischen Projektil- und Targetelektron ist im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie gegeben durch (BB83)

$$(24) \quad a_{fi} = -i \int dt \int d^3r \Psi_f^*(\vec{r}) \frac{z_p}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} \Psi_i(\vec{r}) e^{i\epsilon t}$$

Dabei ist $\vec{R} = \vec{b} + \vec{v} t$ der Projektilort, $\vec{b}$ der Stoßparameter und ϵ der Energieübertrag. $\Psi_f^*(\vec{r})$ steht für das gestreute, $\Psi_i(\vec{r})$ für das gebundene Elektron. Zeitintegration und Fouriertransformation der Coulombwechselwirkung ergibt mit Impulsübertrag q

$$(25) \quad a_{fi} = -i \frac{z_p}{\kappa} \int \frac{d^3q}{q^2} e^{i\vec{q}\vec{b}} \int d^3r \Psi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \Psi_i(\vec{r}) \int d\epsilon \delta(\epsilon - \vec{q}\vec{v})$$

Integration von $|a_{fi}|^2$ über $\vec{b}$ liefert schließlich den Wirkungsquerschnitt:

$$(26) \quad \frac{d\sigma}{d^3k} = \frac{4 z_p^2}{v} \int \frac{d^3q}{q^4} \left| \int d^3r \Psi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \Psi_i(\vec{r}) \right|^2 \int d\epsilon \delta(\epsilon - \vec{q}\vec{v})$$

$$= \frac{4 z_p^2}{v^2} \kappa \int_{q_{\min}}^{\infty} \frac{dq}{q^3} \int_0^{2\pi} d\varphi_q \left| \langle \Psi_f | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \Psi_i \rangle \right|^2$$

φ_q ist der Azimutwinkel zwischen von $\vec{k}$ und $\vec{q}$ bezüglich $\vec{v}$, $q_{\min} = \epsilon/v$ der minimale Impulsübertrag.

Ein ähnlicher Ausdruck für den Wirkungsquerschnitt in Bornscher Näherung ist aus der Comptonstreuung und der Elektron-Elektron Streuung bekannt. Das Matrixelement ist dort dasselbe, nur wird nicht über q , sondern über alle möglichen Zustände des gestreuten Elektrons integriert (IN71, BM74, BT73). Dies erlaubt eine analytische Darstellung der Wirkungsquerschnitte, wenn man für das gebundene und das auslaufende Elektron wasserstoffähnliche Wellenfunktionen

einsetzt (EP70). Bei der Ion-Elektron Streuung ist dies nicht möglich, die Integration über q muß numerisch ausgeführt werden. Das Matrixelement und das Integral über φ_q kann für jeden gebundenen wasserstoffähnlichen Zustand explizit angegeben werden, jedoch wird die Rechnung durch den Umstand, daß neben der Quantisierungsachse v auch noch die Richtungen von q und k und alle Winkel zwischen diesen 3 Richtungen eine Rolle spielen, ziemlich kompliziert. Mit den Abkürzungen

$$M = \langle \Psi_f | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \Psi_i \rangle$$

$$Y = q^2 - (k + iz_0)^2$$

$$X = z_0^2 + (\vec{k} - \vec{q})^2 = z_0^2 + k^2 + q^2 -$$

$$2 k q (\cos \theta \cos \theta_e + \sin \theta \sin \theta_e \cos \varphi_q)$$

$$a = Z/k$$

gilt

$$(27) \quad M_{1s} = 2^{3/2} \pi^{-1} e^{ka/2} \Gamma(1-ia) Z^{5/2} \frac{Y^{-ia}}{X^{2-ia}} \cdot$$

$$\cdot (1-ia + (Z/Z_0 + ia) X/Y)$$

Γ bezeichnet die Eulersche Gammafunktion, Z_0 die Kernladung, soweit sie in Ψ_i vorkommt und θ den Winkel zwischen $\vec{q}$ und $\vec{v}$. Ist O_{nlm} ein Differentialoperator mit

$$e^{i\vec{q}\vec{r}} \Psi_{nlm} = O_{nlm} e^{i\vec{q}\vec{r}} \Psi_{100}$$

so gilt auch

$$M_{nlm} = O_{nlm} M_{100}$$

Das Matrixelement kann somit für alle wasserstoffähnlichen

gebundenen Niveaus explizit angegeben werden. Die Radialwellenfunktion wird durch Differentiation nach z_0 , die Kugelflächenfunktion durch Differentiation nach geeigneten Komponenten von q modifiziert (JA83). Durch Einführung der neuen Variablen z_0 wird sichergestellt, daß der Operator O_{nlm} nicht auch auf das z der Coulomb-Streuwelle wirkt. Für die L-Schale erhält man

$$\begin{aligned}
 O_{2s} &= 2^{-3/2} (1 + z_0 \frac{\partial}{\partial z_0}) \\
 (28) \quad O_{2p,m=0} &= 2^{-3/2} (-i z_0) \frac{\partial}{\partial q_z} \\
 O_{2p,m=1} &= 2^{-3/2} (-i z_0) \frac{\partial}{\partial q_-} \\
 q_- &= q_x - i q_y
 \end{aligned}$$

Ein allgemeiner expliziter Ausdruck für M_{nlm} wurde in jüngster Zeit durch Partialwellenanalyse gefunden (BE84). Zur $\mathcal{P}_q$ -Integration schreibt man $|M|^2$ als Summe von Potenzen von X , da nur X und q von $\mathcal{P}_q$ abhängen:

$$(29) \quad |M|^2 = \sum_{m=-2}^2 F_m(q, k, \theta_e) X^{-m}$$

Die Integration kann dann in geschlossener Form durchgeführt werden:

$$\begin{aligned}
 (30) \quad \int_0^{2\pi} d\varphi_q X^{-m} &= 2\pi (A^2 - B^2)^{-m/2} P_{m-1}(A/\sqrt{A^2 - B^2}) \\
 A &= z_0^2 + k^2 + q^2 - 2qk \cos \theta \cos \theta_e \\
 B &= 2qk \sin \theta \sin \theta_e
 \end{aligned}$$

P ist das Legendre-Polynom. Das Ergebnis der Azimutintegration für die K-Schale ist in (KJ63) nachzulesen. Die verbleibende Integration über q wird numerisch ausgeführt. Dies ergibt in manchen Fällen Probleme, wenn der Integrand, z.B. im Bereich des BSM, ein schmales Maximum aufweist. Wenn $\theta_e = \theta$, so ist die Position des Maximums $\hat{q}$ durch Gl.31 gegeben:

$$(31) \quad \hat{q}^2 = q_{\min}^2 - z_0^2 - p_z^2$$

Das BSM kommt in diesem Fall durch die relative Lage von $\hat{q}$ und $q_{\min}$ als Funktion von p_z zustande.

Für $E \gg z^2$ kann die Coulomb-Streuwelle durch eine ebene Welle ersetzt werden:

$$(32) \quad \frac{d\sigma}{d^3k} = \frac{4 z p^2}{v} \int d^3p \frac{|\psi_1(p)|^2}{|\vec{k}-\vec{p}|^4} \delta(\epsilon - (\vec{k}-\vec{p}) \cdot \vec{v})$$

Nimmt man weiterhin $k \gg p$ an (peaking approximation), so ergibt sich

$$(33) \quad \frac{d\sigma}{d^3k} = \frac{4 z p^2}{v^2} k^{-4} J(p_z)$$

in Übereinstimmung mit der Impulsnäherung.

Im Fall $z \ll v$ kann die Integrationsvariable p durch p_z approximiert und in den Vorfaktor eingesetzt werden:

$$(34) \quad \frac{d\sigma}{d^3k} = \frac{4 z p^2}{v^2} (k^2 + p_z^2 - 2kp_z \cos \theta_a)^{-2} J(p_z)$$

In dieser Näherung muß nicht mehr $k \gg p$ vorausgesetzt werden, das asymptotische Verhalten für $E \rightarrow \infty$ stimmt mit dem der Bornschen Näherung überein.

2.3.1 Vergleich mit der Impulsnäherung

Zum Test der Impulsnäherung wurde das BSM in Bornscher und Impulsnäherung für wasserstoffähnliche gebundene Elektronenzustände der K- und L-Schale berechnet. Abschirmung des Kerns durch andere Elektronen wurde nicht berücksichtigt. Abb.8 zeigt Wirkungsquerschnitte für 22 MeV p auf Ti, bzw. Al

bei 0° . Es besteht gute Übereinstimmung in der Nähe der Maxima der beiden Kurven für das $1s, 2s$ und $2p$ - Niveau. Die Linienform wird im wesentlichen durch das entsprechende Comptonprofil bestimmt (vgl. Abb. 3). In den Ausläufern der Profile, in denen $p_1 \ll k$ nicht mehr gilt, zeigen sich erwartungsgemäß Abweichungen:

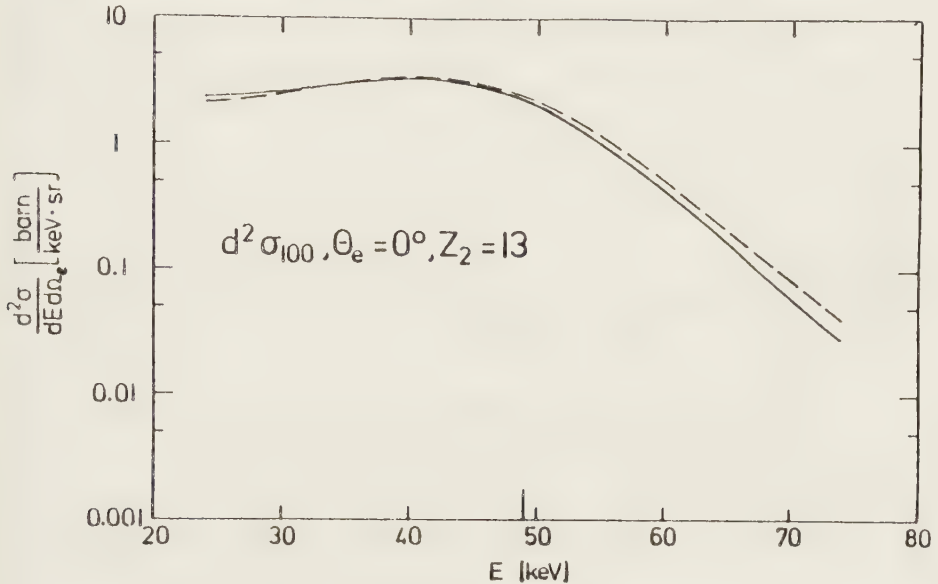


Abb.8 Wirkungsquerschnitte für 22 MeV $p + Al, 0^\circ$
gestrichelt: Impulsnäherung
durchgezogen: Bornsche Näherung

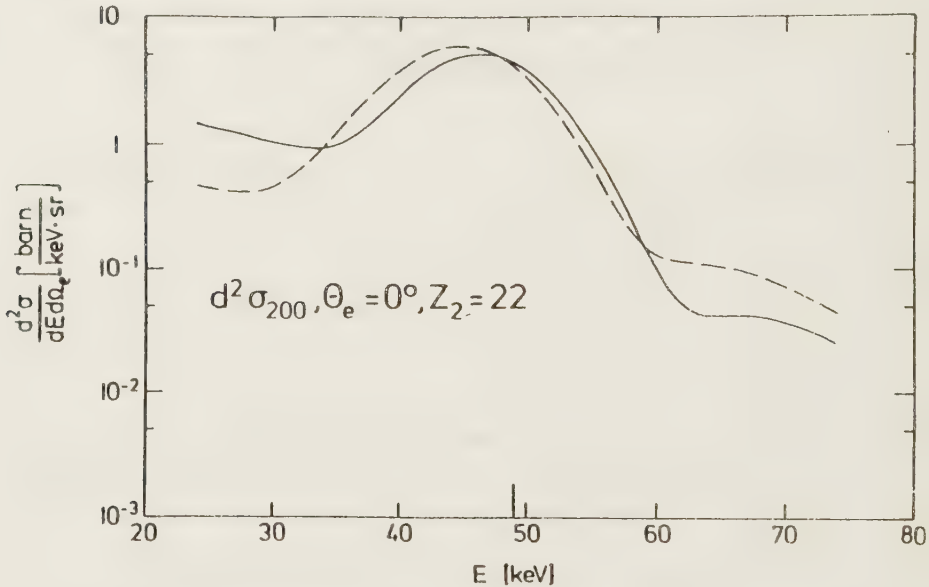
- Für große Energien $E \gg E_b$ liegen die Ergebnisse der Impulsnäherung bei allen Niveaus zu hoch. Für die K- Schale kann man zeigen, daß für $p \rightarrow \infty$

$$d^2\sigma_{\text{Imp}} \sim E^{-7.5}$$

$$d^2\sigma_{\text{Born}} \sim E^{-9.5}$$

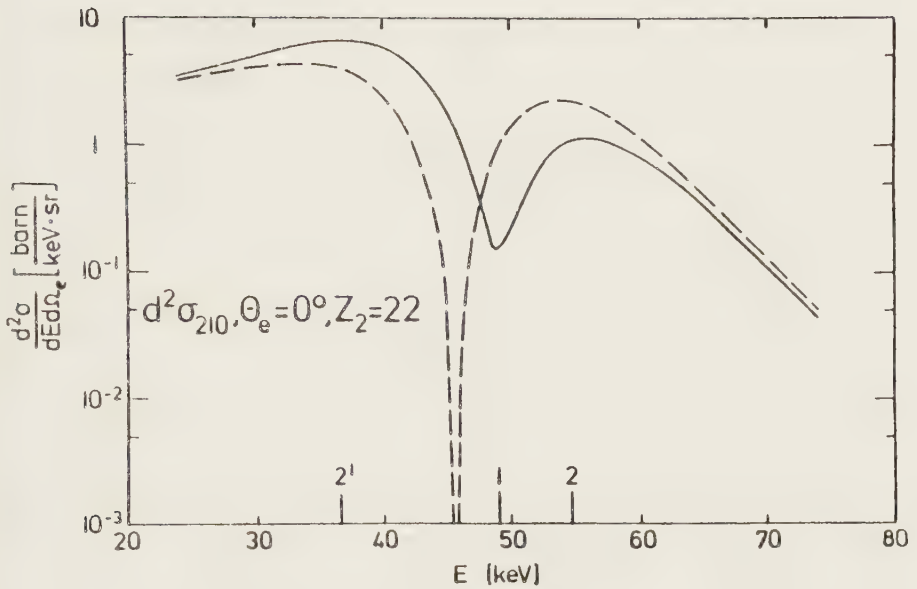
- Die Maxima der Wirkungsquerschnitte in den beiden Theorien weichen, abhängig vom Niveau, geringfügig voneinander ab. Die

Verschiebung liegt jeweils in der Größenordnung der Bindungsenergie. Diese Erscheinung wurde auch bei der Comptonstreuung und der Elektron-Elektron Streuung beobachtet und wird als Comptondefekt bezeichnet (EP70, BM74, MB75, WM82). Die Abhängigkeit der Verschiebung vom Niveau ist allerdings unterschiedlich (Abb.9).

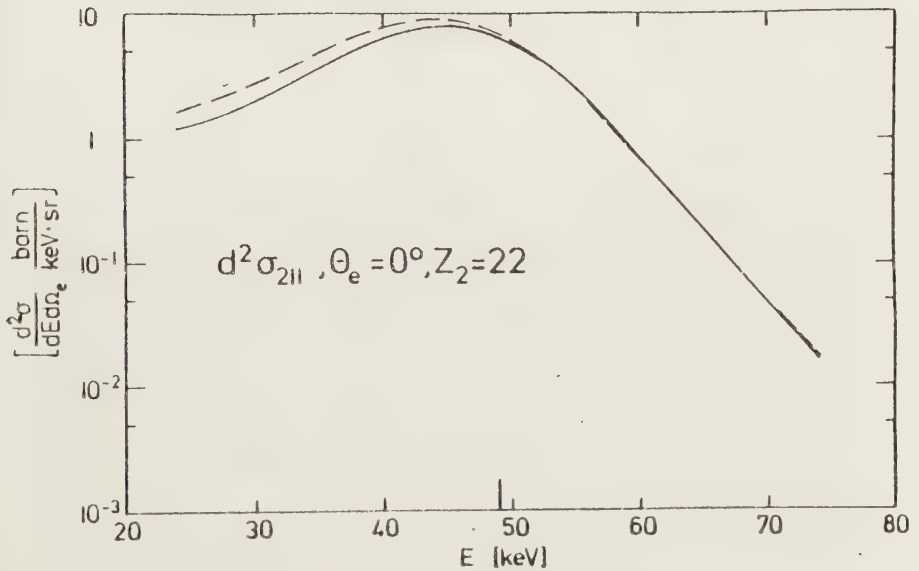


Wirkungsquerschnitte für 22 MeV p + Ti, 2s, 0°

Die Maxima liegen auch bei der Impulsnäherung nicht genau an der durch die Kinematik (Gl. 9) gegebenen Stelle. Die Bindungsenergieverschiebung $2E_B$ wird durch den "Rutherfordfaktor" q^{-4} bei allen Schalen um Energien in der Größenordnung der Bindungsenergie vergrößert (Tabelle 2). Das Maximum der Bornschen Näherung liegt bei E_B , das der Impulsnäherung bei E_I . Wiederum wurde $\theta_e = 0^\circ$ gesetzt und Abschirmung des Kerns hinsichtlich der Bindungsenergie und der Wellenfunktion vernachlässigt.



Wirkungsquerschnitte für 22 MeV p + Ti, 2p, m=0, 0⁰



Wirkungsquerschnitte für 22 MeV p + Ti, 2p, m=1, 0⁰

Tabelle 2 : Comptondefekt für 1s,2s,2p - Zustände,
 $\theta_e = 0^\circ$

Z	E_B/keV	$(E_B - E_I)/E_b$	$(E_{\text{max}} - E_I)/E_b$
1s			
1	48.935	-0.2	1.00
5	47.877	-0.19	1.05
10	44.28	-0.20	1.25
15	36.0	-0.37	1.89
2s			
2	48.957	0.9	0.40
10	48.446	0.86	0.42
20	46.83	0.91	0.49
30	44.0	1.03	0.65
2p,m=1			
2	48.946	0.4	0.75
10	48.179	0.44	0.79
20	45.70	0.51	0.92
30	41.12	0.72	1.29

- Bei Wellenfunktionen mit besonderen Strukturen, 2s und 2p, $m=0$, ergeben sich deutlichere Unterschiede. Der Radialknoten der 2s - Wellenfunktion tritt bei der Bornschen Näherung als 2. Maximum in Erscheinung. Dieser Effekt ist auch bei der Comptonstreuung bekannt, ist dort aber viel ausgeprägter (BM74). Die Wirkungsquerschnitte für 2p, $m=0$ erreichen bei $p_z=0$ in Bornscher Näherung nicht den Wert 0 wie in der Impulsnäherung, da das Matricelement nicht auf der ganzen Knotenebene verschwindet.

Die Impulsnäherung der Ion-Elektron Streuung zeigt also ähnliche Abweichungen von einer genaueren Theorie wie die der Comptonstreuung, die Abhängigkeit der Abweichungen

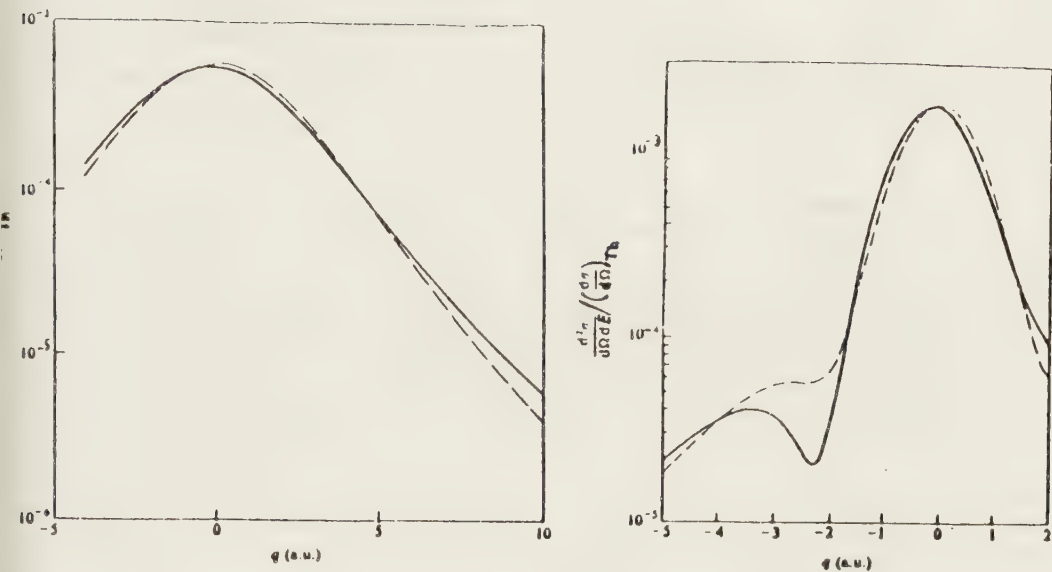


Abb.9 Comptonstreuquerschnitte für $Z=5, E_1=20$ keV (BM74)
 Streuwinkel= 180° , umgerechnet in Comptonprofile
 gestrichelt: Impulsnäherung
 durchgezogen: Bornsche Näherung

von den gebundenen Elektronenzuständen ist aber qualitativ unterschiedlich wegen der anderen Kinematik und des "Rutherfordfaktors" q^{-4} , der bei der Comptonstreuung fehlt. In Abb.10 ist das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte nach Bornscher und der Impulsnäherung für die K-Schale und $\theta_e = 0^\circ$ gegen die Elektronenenergie aufgetragen. Das Diagramm hängt bei der verwendeten Skalierung nicht von der Projektilgeschwindigkeit ab. Das unterschiedliche asymptotische Verhalten beider Theorien für $E \rightarrow \infty$ wird deutlich. Die Abweichung für kleine Z/v ist auf die peaking approximation zurückzuführen und entspricht etwa dem Verhältnis der Vorfaktoren in Gl.34 und Gl.33. Die Abweichungen bei größerem Z/v und kleiner Energie resultieren aus wachsenden Diskrepanzen zwischen der Coulomb-Streuwelle und der ebenen Welle. Der in Abb.10 dargestellte Energiebereich ist für

kleine Z wesentlich größer als die Breite des BSM: die volle Halbwertsbreite $E_{1/2}$ des BSM für $1s$ -Elektronen ist gegeben durch

$$\frac{E_{1/2}}{E_{\max}} = 1.04 \frac{Z}{v} \cos^{-2} \theta_e$$

Im Bereich des BSM und für $Z \ll v$ stimmen Bornsche Näherung und Impulsnäherung also gut überein.

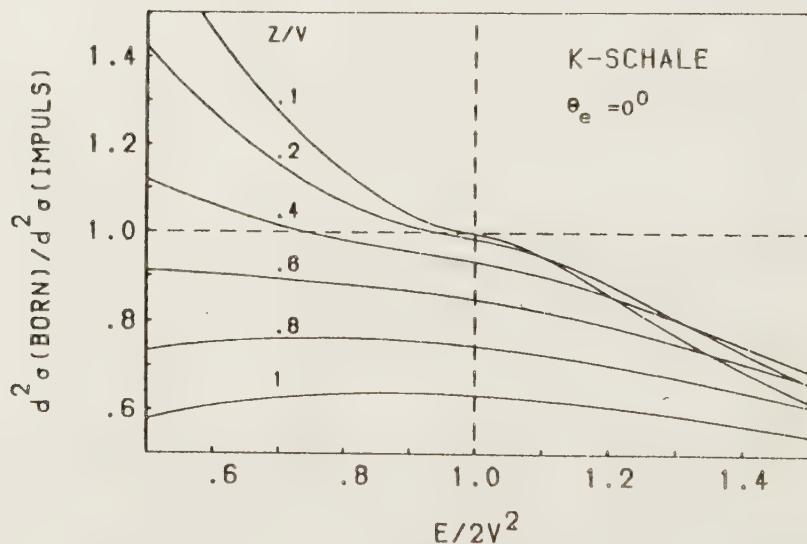


Abb.10 Abweichung zwischen Bornscher und Impulsnäherung in der Ion-Elektron Streuung

3. EXPERIMENT UND AUSWERTUNG

3.1 Meßanordnung

Ziel der Messungen war es, energie- und winkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte im Bereich des BSM für Protonen mit 22 MeV, das ist etwa die höchste am MP-Tandembeschleuniger in München erreichbare Protonenenergie, zu erhalten. Das BSM für $\theta_e = 0^\circ$ liegt dann bei etwa 50 keV. Zu diesem Zweck wurde ein doppeltfokussierendes Elektronenspektrometer gebaut, das die Bestimmung dieser Wirkungsquerschnitte für Energien $20 \text{ keV} < E < 80 \text{ keV}$ und für Winkel $0^\circ, 20^\circ < \theta_e < 110^\circ$ ermöglicht.

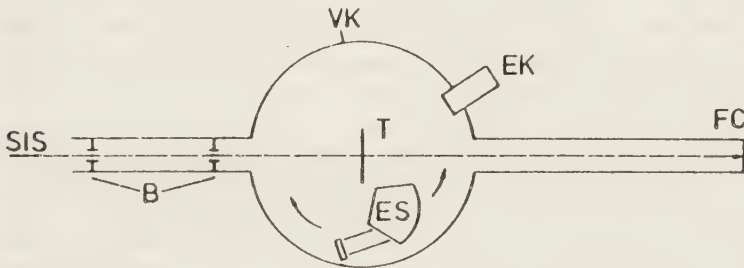


Abb.11 Meßaufbau: (SIS) Ionenstrahl, (B) Strahlblenden, (FC) Faraday-Cup, (VK) Vakuunkammer, (T) Target, (EK) Elektronenkanone, (ES) Elektronenspektrometer

Der Meßaufbau ist in Abb.11 skizziert. Der Protonenstrahl wird durch Blenden B auf das Target gerichtet und im Faraday-Cup gestoppt, der gleichzeitig die Intensität des Strahls mißt. Das Elektronenspektrometer kann um eine Achse durch den Schnittpunkt Strahl-Target geschwenkt werden und erlaubt somit die Messung von Ionisationsquerschnitten für verschiedene Winkel θ_e . Die Breite des Protonenstrahls am Targetort, die das Energieauflösungsvermögen des Spektrometers wesentlich beeinflusst, betrug etwa 2 mm. Eine Verringerung der Strahlbreite durch zusätzliche Blenden

erwies sich wegen der Erhöhung des Untergrundbeitrags in den Elektronenspektren als unzumutbar. Die Elektronenkanone diente zur Energieeichung des Spektrometers.

3.2 Elektronenspektrometer

3.2.1 Aufbau des Spektrometers

Elektrostatische Analysatoren sind in dem geforderten Energiebereich wegen der hohen notwendigen Spannungen schwer zu handhaben, Orangenspektrometer und Kreisspektrometer wegen der Forderung nach Winkelauflösung bzw. Zugänglichkeit des Targets kaum geeignet. Bei der Konzeption des Spektrometers war ferner zu berücksichtigen, daß insbesondere der Nachweis von Elektronen in Strahlrichtung ($\theta_e = 0^\circ$) möglich sein sollte. Wegen der Normierbarkeit der Comptonprofile war eine genaue Kenntnis der Transmission des Spektrometers nicht erforderlich. Die hohen Wirkungsquerschnitte der Proton-Elektron Streuung erlaubten es auch, durch Verwendung kleiner Blenden die Auflösung des Spektrometers auf Kosten der Transmission zu erhöhen. Der Nachweis unerwünschter Teilchen, wie Gamma- und Röntgenstrahlung sowie in der Streukammer und im Spektrometer gestreuter Elektronen und rutherfordgestreuter Protonen mußte durch geeignete Abschirmung unterdrückt werden.

Schließlich wurde ein doppeltfokussierender symmetrischer 115° -Sektormagnet mit homogenem Feld gewählt. Die einfache Feldgeometrie ermöglicht die Berechnung der Brennpunkte und die Optimierung der Energieauflösung des Magneten. Der Ablenkwinkel 115° ergab sich aus der Forderung nach maximal möglichem Bahnradius (und damit maximaler Energieauflösung) bei gegebener Größe des Spektrometers einschließlich Target und Detektor. Den Aufbau des Spektrometers zeigt Abb. 12.

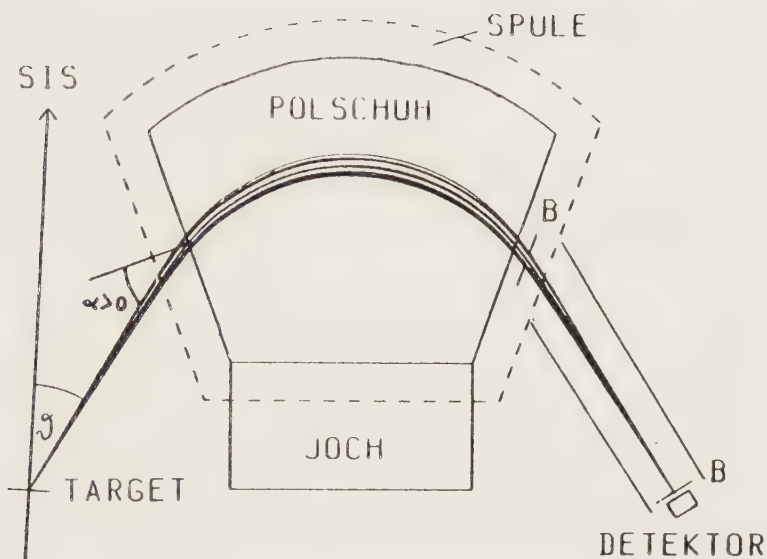
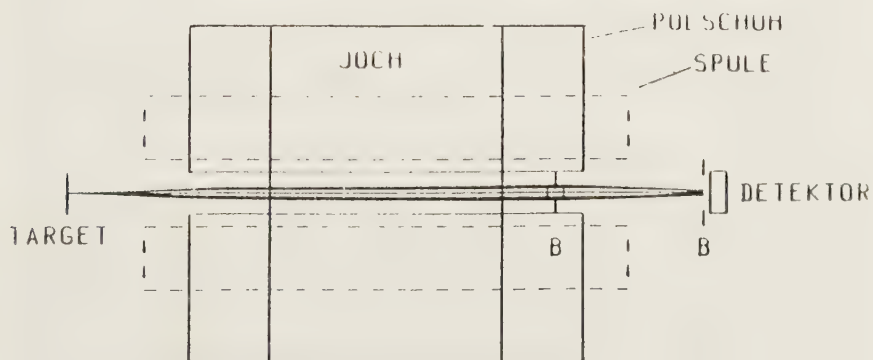


Abb.12 Aufbau des Spektrometers mit Elektronenbahnen, horizontaler Schnitt



vertikaler Schnitt durch das Spektrometer

Das Spektrometer besteht im wesentlichen aus dem Sektormagneten, 2 Blenden und dem Detektor. Im Sektormagneten werden die Elektronen um 115° abgelenkt und horizontal und vertikal auf den Detektor fokussiert. Das Target und die beiden Blenden legen die Elektronenbahn fest. Die Position der Vorblende bestimmt die Richtung, die der Detektorblende die Energie der nachgewiesenen Elektronen. Entsprechend ist die Winkelakzeptanz und damit die Transmission durch die Breite der Vorblende, die Energieauflösung neben anderen Faktoren durch die Breite der Detektorblende gegeben. Die Detektorblende befindet sich daher im Bildpunkt des Magneten. Um bei der Spektroskopie von Elektronen in Strahlrichtung den Protonenstrahl nicht zu stören, wurde die Vorblende auf der Detektorseite angebracht. Der Krümmungsradius der Bahn innerhalb des Sektorfeldes beträgt 5 cm, der Zusammenhang zwischen Elektronenenergie und Magnetfeld ergibt sich somit aus

$$(35) \quad r = p/eB = 5 \text{ cm}$$

Die Energie der Elektronen kann durch Änderung des Spulenstroms, die Emissionsrichtung durch Schwenken des Spektrometers eingestellt werden. Zur Erzeugung des Magnetfelds dienen zwei Erregerspulen mit je 80 Windungen, die sich zur Verringerung des Streuflusses direkt an den Polschuhen befinden. Wegen der Hysterese des Eisens besteht kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Spulenstrom und Magnetfeld, die Breite der Hystereseschleife (hier: $B(I)$ für $B \ll B_{\text{Sättigung}}$) ist proportional zur Koerzitivfeldstärke H_C des Eisens und zum überstrichenen Spulenstromintervall. Um die Hysterese möglichst klein zu halten, wurden Polschuhe und Joch des Magneten aus Magnetreineisen gefertigt, das aus etwa 99,9% Eisen besteht und eine kleine Koerzitivfeldstärke und hohe Permeabilität μ aufweist (typische Werte $H_C = 0.1$ Oe, $\mu = 1000$). Durch nachträgliches Glühen des Magneten in Wasserstoff und langsames Abkühlen wurde die Koerzitivfeldstärke weiter verringert. Die Feldstärke, die mit einer Hallsonde gemessen wurde, in Abhängigkeit vom Spulenstrom zeigt Abb. 13. Die Abweichung beider Kurven beträgt maximal

0.6 mT, dem entspricht eine Elektronenenergie $\Delta E = 2.5 \text{ keV}$.

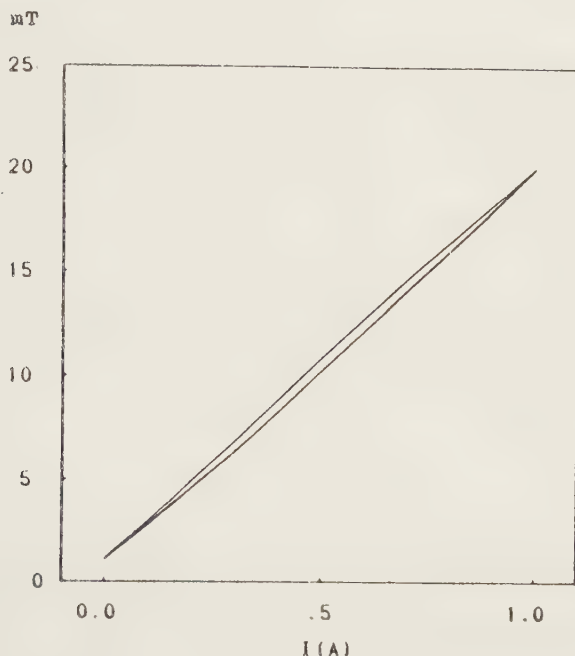


Abb.13 Magnetfeld des Spektrometers
in Abhängigkeit vom Strom

Eine Kühlung der Spulen war wegen der geringen Verlustleistung ($< 1 \text{ W}$) nicht notwendig. Der nachweisbare Energiebereich des Spektrometers erstreckte sich im Prinzip, bedingt durch den Detektor, bis 300 keV, in den Experimenten dieser Arbeit konnten jedoch wegen des steilen Abfalls der Wirkungsquerschnitte nach hohen Energien und der geringen Transmission des Spektrometers Elektronen mit Energien $E > 80 \text{ keV}$ nicht mehr nachgewiesen werden.

Zum Nachweis der Elektronen wurde ein pn-Halbleiterzähler verwendet. Solche Zähler sind Oberflächensperrschichtzählern

wegen des kleineren Sperrstroms hinsichtlich der Energieauflösung überlegen (KE80). Die Energieinformation des Detektors ist wegen des Spektrometers prinzipiell nicht notwendig, sie erleichtert aber die Diskriminierung des Untergrundes und die genaue Bestimmung der Elektronenenergie. Die aktive Schicht hatte eine Fläche von $10 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ und eine Dicke von 0.3 mm , ausreichend, um Elektronen mit Energien bis 300 keV zu stoppen. Die Energieauflösung des Detektors wurde durch elektronisches Rauschen infolge Sperrstrom, Kapazität des Detektors und des Anschlußkabels sowie das Rauschen des Vorverstärkers bestimmt und auch durch Licht und Mikrofonie beeinträchtigt. Mit einem geeigneten Vorverstärker und einer Impulsformungszeit von $2 \mu\text{s}$ am Hauptverstärker wurde eine Energieauflösung $E=5 \text{ keV}$ erreicht.

3.2.2 Magnetoptik

Ausführliche Darstellungen der Optik von Sektormagneten findet man in (EH53, EN67, ML76). Im folgenden werden die wichtigsten Abbildungseigenschaften von Sektormagneten mit homogenem Feld und insbesondere bei symmetrischem Strahlengang angegeben. Die Abbildungseigenschaften des Sektormagneten werden vom homogenen Feld im Innern und den Randfeldern bestimmt: Das homogene Feld bewirkt eine horizontale Fokussierung, bei schrägem Einfall der Elektronen unter positivem Eintrittswinkel α (s. Abb. 12) erhält man eine vertikale Fokussierung durch das Randfeld und eine Abschwächung der horizontalen (EN67). Im folgenden wird angenommen, daß das Feld nur vom Abstand z von der Symmetrieebene und vom Abstand x von der Ebene der Polschuhkanten abhängt und damit auch die Komponente B_y parallel zu den Kanten verschwindet. Dies ist unter der Voraussetzung, daß die Länge der Polschuhkanten größer als der 5-fache Polschuhabstand ist, in guter Näherung erfüllt. Bei senkrechtem Ein- und Austritt liegen Gegenstand, Bild und Vertex auf einer Geraden (Bildtheorem, s. Abb. 14). Hierbei wird angenommen, daß das Magnetfeld innerhalb gewisser

Grenzen, den effektiven Feldgrenzen, homogen ist und außerhalb verschwindet. Die Feldgrenzen ergeben sich aus der Forderung, daß der Ablenkwinkel richtig wiedergegeben wird, zu

$$(36) \quad \int_{\text{Pol}}^{\infty} B_z(x) dx = B_{\text{max}} \cdot s$$

B_{max} ist das homogene Feld zwischen den Polschuhen, s der Abstand Feldgrenze-Polschuh.

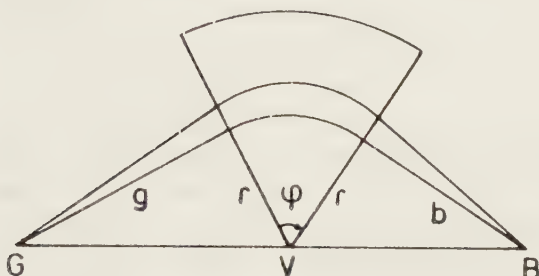


Abb.14 Bildtheorem (BA33,ST34)

Die effektiven Feldgrenzen liegen im allgemeinen außerhalb der Polschuhe. Der Abstand zwischen Polschuhkanten und Feldgrenzen ist gewöhnlich etwa halb so groß wie der Abstand der Polschuhe, kann jedoch durch Anbringen von Spiegelplatten und hyperbolisches Abrunden der Polschuhkanten reduziert werden (SC73, CI71). Die effektiven Feldgrenzen beschreiben die horizontale Abbildung in guter Näherung richtig, es ergibt sich nur eine leichte Parallelverschiebung der Strahlen (abhängig von der Breite des Randfelds) außerhalb des Sektorfelds. Bei symmetrischem Strahlengang erhält man aus Abb.14

$$(37) \quad g = b = r \cot (\varphi/2)$$

g ist die Gegenstandsweite, b die Bildweite, r der Bahnradius und φ der Ablenkwinkel. Gegenstands- und Bildweite werden von den Feldgrenzen aus gemessen. Die Abbildung bei schrägem Ein- und Austritt setzt sich zusammen aus der Abbildung mit orthogonalem Ein- und Austritt und der Wirkung zweier Linsen, die sich an den beiden Feldgrenzen befinden. Wegen

$$(38) \quad \text{rot } \vec{B} = 0 \rightarrow B_x \approx z \cdot \frac{\partial B_z}{\partial x}$$

und der positiven Geschwindigkeitskomponente $v_y = v \cdot \sin(\alpha)$ für einen Eintrittswinkel $\alpha > 0^\circ$ wirkt auf Elektronen außerhalb der Symmetrieebene eine Kraft in Richtung auf diese. Das Randfeld besitzt also eine positive vertikale Brennweite

$$(39) \quad f_y = r \cot \alpha$$

Die horizontale Abbildung beruht auf der Abhängigkeit der Bahnlänge im Sektorfeld von der Emissionsrichtung. Bei positivem Eintrittswinkel wird diese Abhängigkeit reduziert, das Randfeld wirkt also horizontal als Linse mit negativer Brennweite $f_H = -f_y$.

Bei geeigneten Ein- und Austrittswinkeln wird das Target horizontal und vertikal auf einen Punkt abgebildet. Für einen symmetrischen Strahlengang ergibt sich:

$$(40) \quad g = b = r \cot \alpha = 2 r \cot(\varphi/2)$$

Die Elektronenbahnen verlaufen dann im Sektorfeld parallel zur Symmetrieebene.

Die bisherigen Betrachtungen gelten streng nur für unendlich schmale Randfelder. Bei ausgedehnten Randfeldern ist die vertikale Brennweite größer, denn die vertikale Fokussierung findet vorwiegend dort statt, wo das Feld am schnellsten abfällt; auf dem Weg dorthin hat das Elektron im Randfeld aber schon eine horizontale Ablenkung erfahren, sodaß in Gl. 39 ein kleinerer Eintrittswinkel einzusetzen ist (EN67).

3.2.3 Feldverlauf

Um die Lage der Feldgrenzen zu bestimmen, von denen die richtige Position von Target und Detektorblende abhängen, und um einige Bildfehler abzuschätzen, wurde der Feldverlauf mit

einer Hallsonde in x-Richtung innerhalb der Symmetrieebene gemessen. Der Feldverlauf ist in Abb.15 dargestellt und kann innerhalb der Meßfehler (0.1 mT) durch folgende Funktion beschrieben werden:

$$B=B_{\max}/(1+\exp(c_4x^3+c_3x^2+c_2x+c_1))$$

$$c_1=-1.323$$

$$c_2=4.243 \text{ cm}^{-1}$$

$$c_3=-1.878 \text{ cm}^{-2}$$

$$c_4=0.398 \text{ cm}^{-3}$$

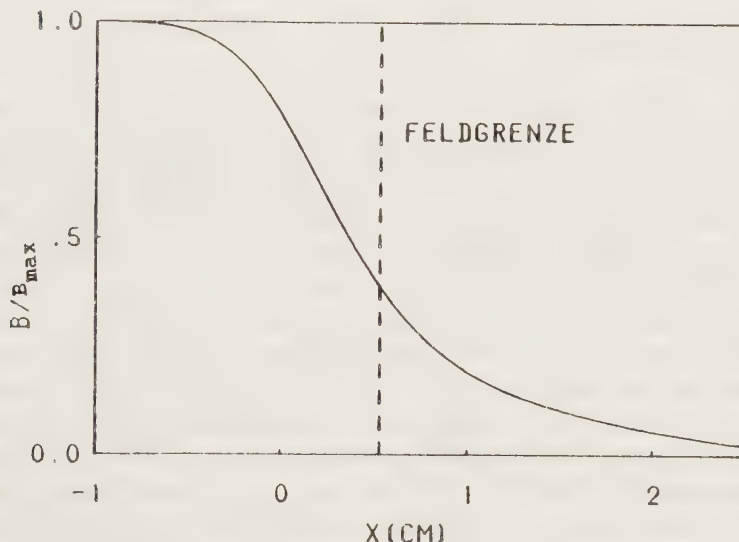


Abb.15 Feldverlauf des Magneten

x ist der Abstand von den Polschuhkanten.

Das Feld außerhalb der Symmetrieebene in nicht zu großer Entfernung ergibt sich näherungsweise durch analytische Fortsetzung dieser Funktion.

Aus dem Feldverlauf wurde der Abstand der Feldgrenzen von den Polschuhkanten zu $5.3 \text{ mm} = 0.53 \cdot \text{Polschuhabstand}$ ermittelt. Die vertikale Bildweite ist rechnerisch um etwa 3cm

größer als die horizontale . Auf eine Korrektur dieses Effektes wurde verzichtet , da er die Transmission des Spektrometers nur unwesentlich verringert und die Energieauflösung nicht beeinflußt.

3.2.4 Energie- und Winkelauflösung

Die Energieauflösung eines doppeltfokussierenden symmetrischen Sektormagneten ist gegeben durch

$$(45) \quad \Delta E/E = \Delta y/2r$$

Primär wird durch die Geometrie des Spektrometers die Impulsauflösung bestimmt , die Energieauflösung hat bei nichtrelativistischen Elektronenenergien den doppelten Wert. Der Wert von Δy wird hier weitgehend durch die Breite des Protonenstrahls am Targetort bestimmt, die durch Fokussierung und durch Strahlblenden auf etwa 2 mm begrenzt werden konnte . Weitere Beiträge zu Δy sind die Breite der Detektorblende und unscharfe Abbildung durch sphärische Aberration und ungenaue Kenntnis des Bildpunktes. Die Breite der Detektorblende betrug 0.5 mm und die des Elektronenbündels am Ort der Detektorblende dank der kleinen Winkelakzeptanz weniger als 0.5 mm. Da die energetische Lage des BSM vom Winkel θ_e abhängt, liefert die Winkelakzeptanz einen zusätzlichen indirekten Beitrag zur Energieauflösung (genauer: zur intrinsischen Impulsauflösung des extrahierten Comptonprofils), der bei $\theta_e=0$ am kleinsten ist.

Wegen der hohen Intensität des BSM konnte durch Wahl einer entsprechend kleinen Vorblende der Einfluß der Winkelakzeptanz auf die Energieauflösung auf Kosten der Transmission klein gehalten werden, den wesentlichen Beitrag liefert somit die Breite des Protonenstrahls. Hieraus ergibt sich die Energieauflösung zu 2%, dem entspricht nach Gl. (11) eine intrinsische Impulsauflösung $\Delta p_z=0.6$. Dieser Wert ist deutlich größer als bei der Comptonstreuung (0.1-0.35), aber angesichts einer Breite der Festkörpervalenzcomptonprofile

$AP_2 \approx 2$ noch akzeptabel.

Die Winkelakzeptanz ist durch den geometrischen Blickwinkel der Detektorblende, gesehen vom Detektor, bzw. vom vertikalen Bildpunkt, gegeben: 1.7^0 horizontal und 1.5^0 vertikal. Der Akzeptanzbereich stellt somit einen schwach elliptischen Kegel dar, die Transmission T ergibt sich daraus zu $T=2.5$ msr.

Tabelle 3 : Daten des Spektrometers

Energiebereich:	20 - 300 keV
Winkelbereich:	$0^0, 20^0 - 110^0$
Impulsauflösung:	0.01
Winkelauflösung:	1.7 Grad * 1.5 Grad
Transmission	2.5 msr
akzeptierter Energie- und Raumwinkelbereich $dE d\Omega$:	$1.25 * 10^{-5} E * sr$
Blenden:	5 mm Kreisblende $0.5 * 10$ mm Schlitzblende
Ablenkwinkel:	115 Grad
Bahnradius:	50 mm
Ein- und Austrittswinkel:	38 Grad
Gegenstandsweite:	64 mm
Bildweite:	64 mm horizontal ≈ 95 mm vertikal
Abstand der Polschuhe:	10 mm
Windungszahl:	2 * 80
Feldstärke bei 1 A	20 mT
Detektor:	0.3 mm , 10 mm * 10 mm Si, pn - Übergang

3.3 Messung und Auswertung

Die Messungen dieser Arbeit sind in nachfolgender Übersicht zusammengestellt. Die Auswahl der Targets ergab sich weitgehend aus der Forderung nach möglichst geringer Dicke, um

Verfälschungen der Meßergebnisse durch elastische Elektronenstreuung in den Targets zu vermeiden. In den meisten Messungen wurden Elektronen spektroskopiert, die in Projektilrichtung emittiert wurden, da in diesem Fall die intrinsische Impulsauflösung am besten und der Einfluß der elastischen Elektronenstreuung am kleinsten ist.

Übersicht über die durchgeführten Messungen

Projektil	Target	Targetdicke ($\mu\text{g}/\text{cm}^2$)	Winkel (Grad)
22 MeV p	C	20	0
	Al	16	0,30,45
	Ti	31	0
	Cu	72	0
	Ag	65	0

Die Messungen wurden im Online-Betrieb mit den Rechenanlagen PDP 10 bzw. PDP 15 durchgeführt. Durch Variation des Spulenstroms zwischen 0.5 und 1 A konnte der gesamte Bereich des BSM von 20 - 80 keV überstrichen werden. Die Elektronenenergie ergab sich aus dem Linienschwerpunkt des Spektrums nach Eichung mit einer Elektronenkanone, der Wirkungsquerschnitt aus dem Integral über die Linie nach Division durch den in Tabelle 3 angegebenen Energie- und Raumwinkelbereich $dE d\Omega$, der proportional zu E ist. Die Spektren weisen neben elektronischem Rauschen und der Linie einen Untergrund auf, der auf gestreute Elektronen und Gammastrahlung zurückzuführen ist. Elektronen unerwünschter Energie, die durch Streuung an Spektrometerteilen und der Vakuumkammer in den Detektor gelangten, wurden durch zwei zusätzliche Blenden im Spektrometer weitgehend abgeschirmt. Eine vollständige Abschirmung dieser Elektronen ist jedoch gerade im Bereich des BSM wegen der starken Abhängigkeit der Elektronenintensität von der Energie schwierig. Einen weiteren Untergrundbeitrag auf der niederenergetischen Seite der Linie stellt

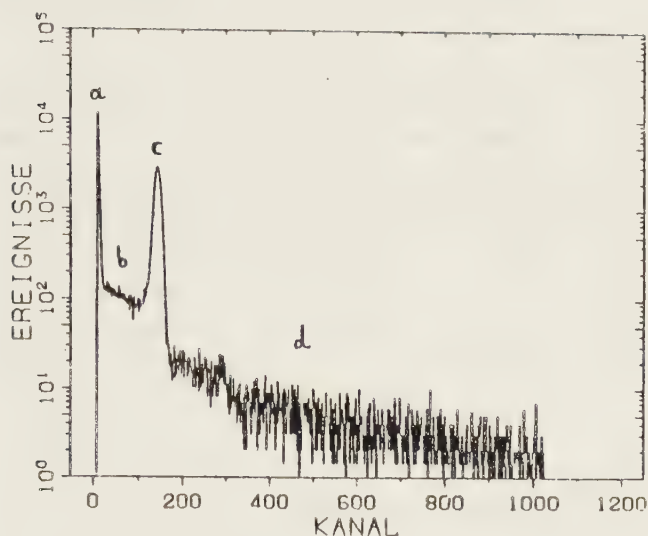


Abb.16 Elektronenspektrum: a) Rauschen, b) Rückstreuung, c) Elektronen, d) Gammauntergrund

die Rückstreuung im Detektor dar: Elektronen können aus der aktiven Schicht des Detektors herausgestreut werden, bevor sie dort die volle Energie deponiert haben. Der hochenergetische Untergrund ist weitgehend auf Gammastrahlung (einige MeV) zurückzuführen, die durch Kernreaktionen der Protonen mit Strahlblenden und Faraday-Cup entsteht. Unterdrückung dieses Untergrundes würde Abschirmung durch etwa 10 cm dicke Bleischichten oder Vergrößerung des Abstandes zwischen Detektor und Strahlblenden und Faraday-Cup erfordern. Dies war aus Platzgründen kaum möglich.

Zur Korrektur wurde jeweils ein Spektrum ohne Target aufgenommen und vom Nutzspektrum abgezogen. Die Anzahl der Protonen wurde durch Integration des Cupstromes ermittelt. Wegen Schwankungen der Strahlintensität und der Ungenauigkeit der Integration konnten die Wirkungsquerschnitte nur auf etwa 5% reproduziert werden. Dieser Fehler gibt die

statistische Abweichung der Meßpunkte voneinander an, der Fehler bei der Absolutbestimmung der Wirkungsquerschnitte war, bedingt durch Fehler der Transmission und der Cupintegration, wesentlich größer. Die Bestimmung der Elektronenenergie wurde durch Untergrund und Schwankungen des Strahlortes erschwert, es ergab sich ein statistischer Fehler von etwa 0.5 keV. Der Einfluß der endlichen Energieauflösung wurde durch Faltung theoretischer Spektren und Vergleich mit den ungefalteten abgeschätzt und lag innerhalb der Meßfehler.

4. ERGEBNISSE

4.1 Atomare Comptonprofile

4.1.1 Das binäre Stoßmaximum für Targetelektronen

Zunächst wird das BSM an einfachen Gasen, wie He und Ar, untersucht, deren Comptonprofil gut bekannt ist. Entsprechende Experimente wurden von Rudd und Toburen durchgeführt (RS66, TW72).

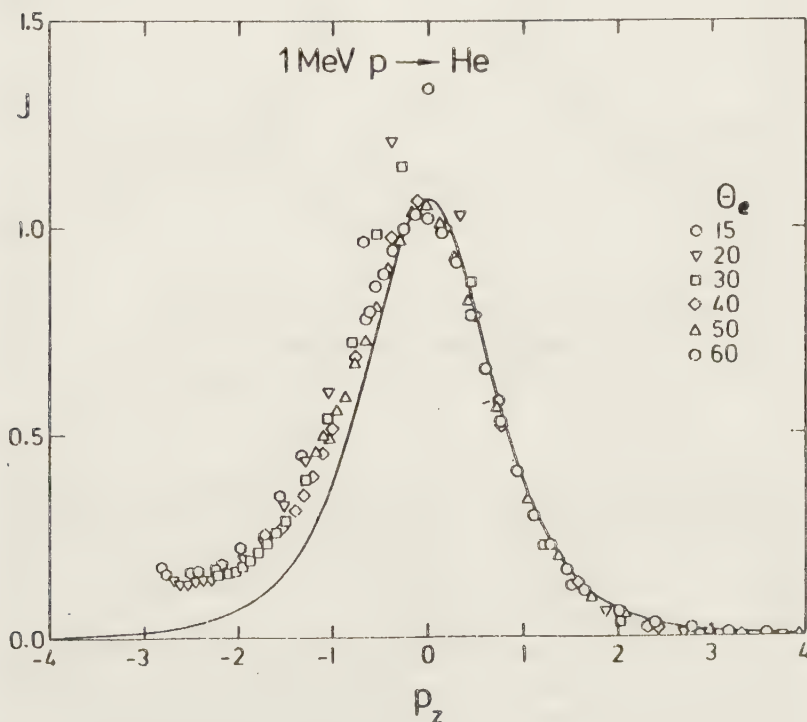


Abb.17 Comptonprofil von He aus 1 MeV p + He
bei verschiedenen Emissionswinkeln
Vergleich mit Hartree-Fock-Comptonprofil

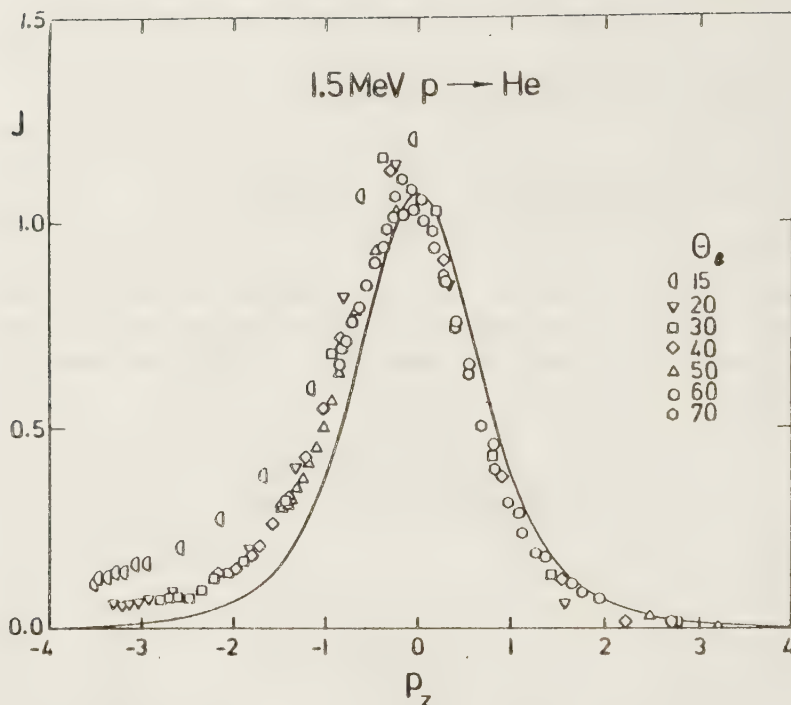


Abb.18 Comptonprofil von He aus 1.5 MeV p + He
bei verschiedenen Emissionswinkeln
Vergleich mit Hartree-Fock-Comptonprofil

Abb.17 und 18 zeigen das Comptonprofil von He, das aus Messungen mit Protonen der Energie 1 MeV, bzw. 1.5 MeV gewonnen wurde. Die Wirkungsquerschnitte aus (RS66, TW72) wurden nach Gl.8 und 13 direkt in Comptonprofile umgerechnet und mit Hartree-Fock-Rechnungen (BM75) verglichen. Der Vergleich erfolgte auf einer absoluten Skala ohne anpaßbare Parameter. Aus optischen Gründen wurde das Vorzeichen von p_z vertauscht, sodaß die linke Bildhälfte der niederenergetischen Seite des BSM entspricht. Für die meisten Meßpunkte erhält man Übereinstimmung innerhalb 5%, angesichts der einfachen Theorie und des angegebenen Meßfehlers von etwa

20% eine erstaunlich gute Übereinstimmung. Dies gilt insbesondere auch für die größeren Winkel, bei denen das BSM wegen der Asymmetrie (Rutherfordquerschnitt) gar nicht mehr in Erscheinung tritt. In Abb. 18 sind Theorie und Experiment leicht gegeneinander verschoben; dies kann auf fehlerhafte Energieeichung oder einen Comptondefekt zurückzuführen sein. Ersetzt man die experimentellen Daten durch die Bornsche Näherung (KJ63), so ergibt sich ein Comptondefekt in derselben Größenordnung und demselben Vorzeichen, wie Abb. 19 zeigt.

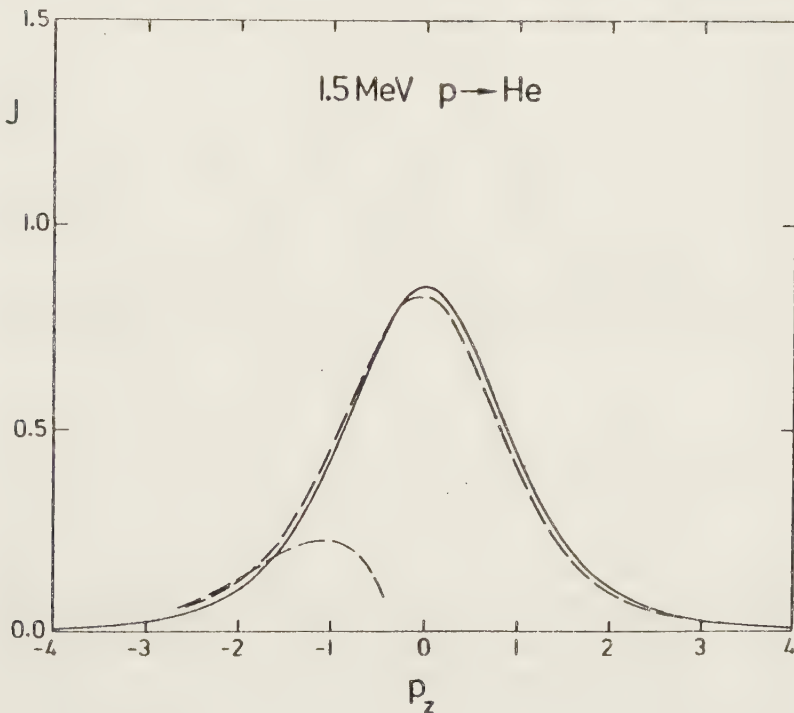


Abb. 19 1.5 MeV $p + He$, 30°
 durchgezogen: Impulsnäherung
 gestrichelt: Bornsche Näherung

In Abb.19 wurde ein Comptonprofil aus Wirkungsquerschnitten in Bornscher Näherung für 1.5 MeV $p + \text{He}$ bei 30° extrahiert (gestrichelte Linie). Beide Kurven sind mit derselben wasserstoffähnlichen Wellenfunktion für He gerechnet. Bei negativen p_z -Werten wird die in Abschnitt 2.2.1 angesprochene Zweideutigkeit des Zusammenhangs zwischen p_z und E sichtbar. Die durch Abb.19 nahegelegte Interpretation der Verschiebung in Abb.18 als Comptondefekt ist allerdings zweifelhaft, da bei einer Projektilenergie von 1 MeV ein ähnlicher Effekt auftreten müßte.

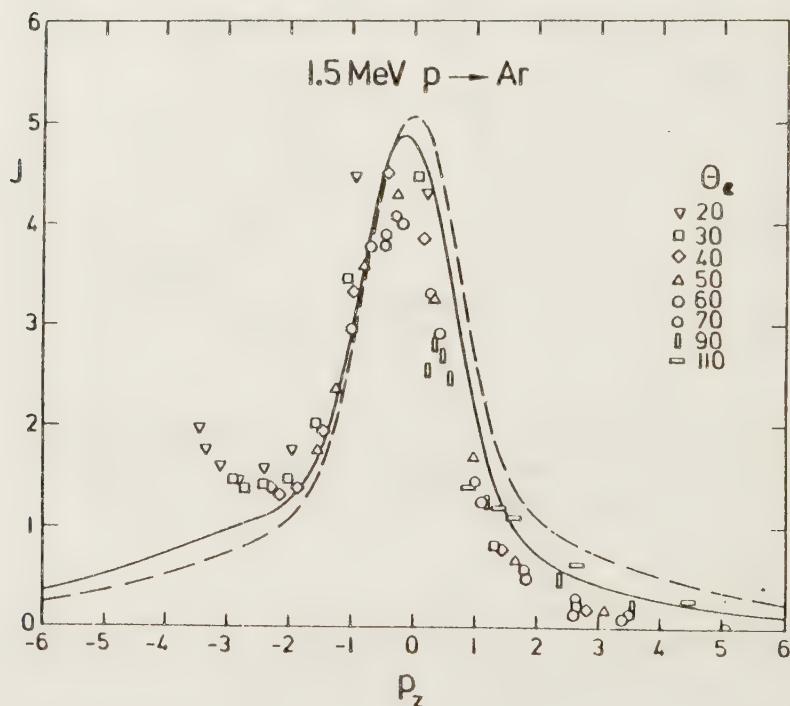


Abb.20 Comptonprofil von Ar für 1.5 MeV p
 und verschiedene Emissionswinkel
 Vergleich mit Hartree-Fock-Comptonprofil
 durchgezogen: mit Bindungsenergie
 gestrichelt: ohne Bindungsenergie

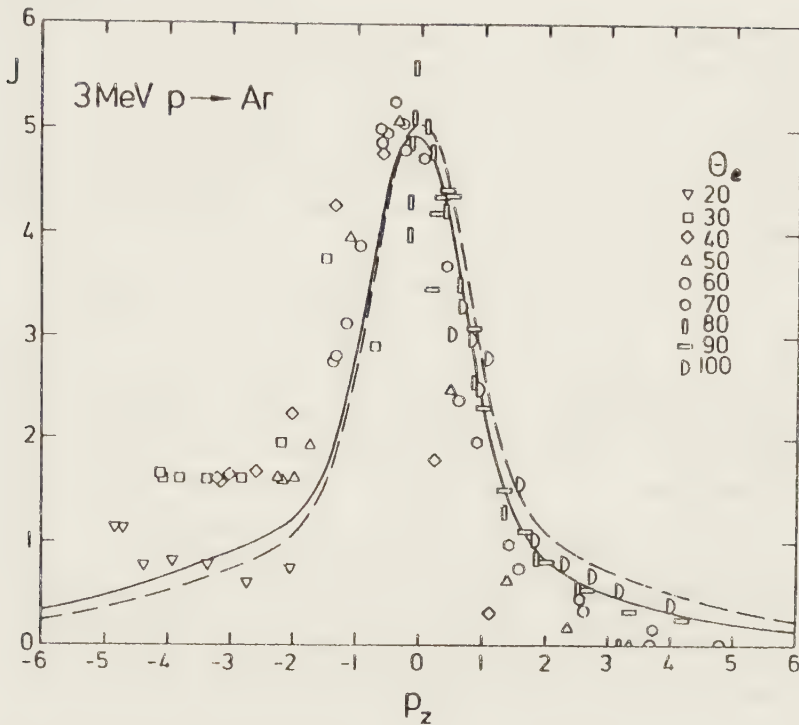


Abb.21 3 MeV p, sonst wie Abb.20

In Abb.20 und 21 sind Comptonprofile von Ar dargestellt. Wegen der unterschiedlichen Bindungsenergien E_b^i der einzelnen Schalen können die experimentellen Wirkungsquerschnitte nicht direkt in Comptonprofile umgerechnet werden, statt dessen wurden die theoretischen Comptonprofile um E_b^i/v verschoben (durchgezogene Linie, gestrichelt: keine Verschiebung), was zu einer deutlichen Asymmetrie führt. Die Darstellung der Beiträge der einzelnen Schalen in Abb.22 zeigt, daß die Asymmetrie im wesentlichen aus der Bindungsenergie der L-Schale resultiert. Der Effekt der Bindungsenergie wird durch die experimentellen Punkte eindeutig bestätigt.

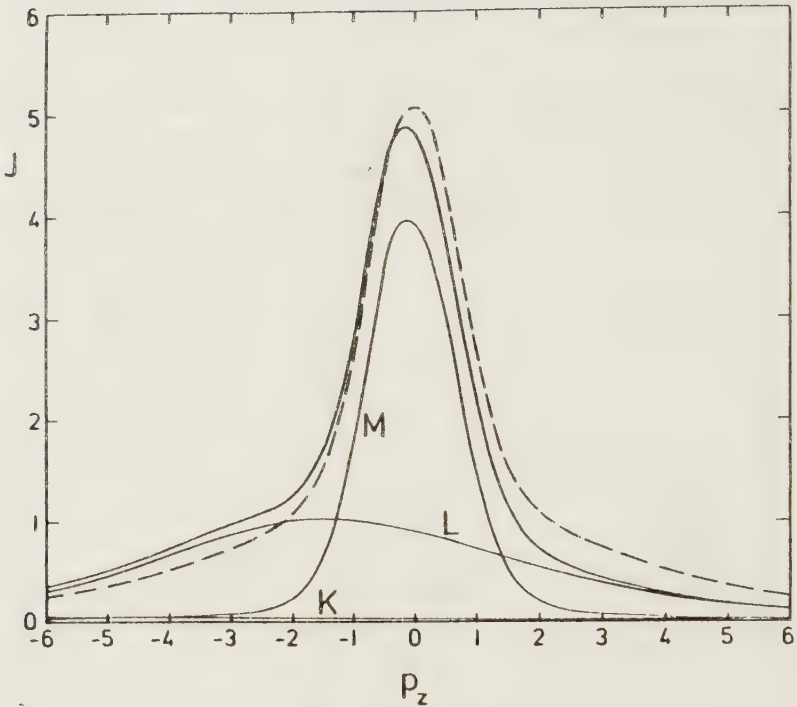


Abb.22 Comptonprofil von Ar, einzelne Schalen und gesamt gestrichelte Kurve: ohne Bindungsenergie

Größere Diskrepanzen zwischen theoretischen und experimentellen Werten erhält man auf der niederenergetischen Seite, vor allem bei kleinen Winkeln und bei Argon. Die Energie- und auch die Winkelabhängigkeit der Abweichungen entspricht qualitativ der des Vorfaktors in Gl.34. Wegen der kleinen Energien wird insbesondere beim Ar die Annäherung der Coulomb-Streuwelle durch eine ebene Welle problematisch. Diese Näherung könnte man durch einen Coulombfaktor $2\pi a (1 - e^{-2\pi a})^{-1}$ (Normierungsfaktor der Streuwelle, $a = Z_{\text{eff}}/k$) verbessern. Z_{eff} bedeutet hier die effektive Targetkernladung für die Streuwelle, die von der für gebundene

Elektronen abweichen kann. Wegen der Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment innerhalb von 5% muß $Z_{\text{eff}} \leq 1$ sein, dann ändert sich der Coulombfaktor jedoch zu wenig im Bereich des BSM, um die Diskrepanzen quantitativ erklären zu können. Ein analoger Coulombfaktor für die Elektronenstreuung im Projektilfeld (MP80) würde die Winkelabhängigkeit der Diskrepanzen qualitativ, aber wegen der geringen Ladung des Protons nicht quantitativ erklären.

4.1.2 Das binäre Stoßmaximum für Projektilelektronen

Messungen von Prost et al. (PS83) für hochionisierte Ne-, bzw. Ar-Ionen auf Ne wurden mit der Impulsnäherung für die Streuung von Projektilelektronen verglichen. Der Atomformfaktor zur Beschreibung der Abschirmung des Targetkerns wurde im Rahmen des Thomas-Fermi Atommodells gleich $F(q) = \lambda^2 / (\lambda^2 + q^2)$ gesetzt, dabei ist $q = 2v \sin(\theta_e/2)$ der Impulsübertrag und $\lambda = Z^{1/3} / 0.88$ der Thomas-Fermi Abschirmparameter.

In Abb. 23 ist das BSM für 200 MeV Ne^{7+} ($1s^2 2s^1$ im Grundzustand) auf Ne bei $\theta_e = 30^\circ$ zu sehen. Neutrale Hartree-Fock Comptonprofile wurden in zweifachdifferentielle Wirkungsquerschnitte umgerechnet und gemäß Gl. 21 um die Ionisierungsenergien (CN70) des Ne^{7+} - Ions verschoben. Verschiebt man stattdessen um die Ionisierungsenergie des neutralen Neons, so befindet sich das BSM an der durch den Pfeil gekennzeichneten Stelle. Der hohe Ionisationsgrad des Projektils beeinflusst demnach wesentlich die energetische Lage und offensichtlich auch die Asymmetrie des BSM, letztere wird durch die niedrige Besetzung der 2s-Schale (1 Elektron) noch verstärkt. Bei erhöhter Elektronenzahl des Projektils tritt der Corebeitrag in den Hintergrund und die Asymmetrie verringert sich entsprechend (vgl. Abb. 24). Zur besseren Übereinstimmung zwischen Theorie und experimentellen Daten wurden diese um etwa 50 eV verschoben, es gibt also auch hier Hinweise auf einen Comptondefekt, der jedoch deutlich kleiner ist als die Verschiebung durch die Ionisierungsenergie des Ne-Ions.

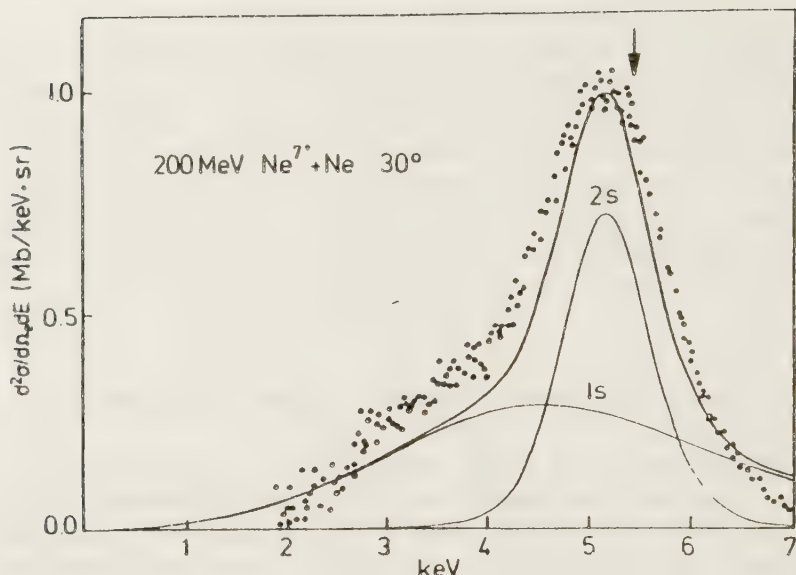


Abb.23 200 MeV Ne^{7+} ($1s^2 2s^1$) + Ne, 30°
 Experiment und Impulsnäherung mit
 neutralen Hartree-Fock Comptonprofilen

Die theoretischen Kurven sind in beiden Fällen zu schmal, dies ist auf die zu große Abschirmung der verwendeten Wellenfunktionen zurückzuführen. Beschreibt man das 2s-Elektron, das den Hauptbeitrag zum BSM liefert, durch ein wasserstoffähnliches Comptonprofil mit $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$, so wird für $\sigma = 4$ das neutrale Hartree-Fock Comptonprofil gut wiedergegeben, während für $\sigma = 0$ die Abschirmung völlig vernachlässigt wird. Die Abschirmung sollte demnach zwischen diesen beiden Extremwerten liegen; ein Vergleich mit Abb.25 ergibt weitgehende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment für $\sigma = 2$ beim System 200 MeV Ne^{7+} auf Ne. Der Wert $\sigma = 2$ erklärt sich aus der naheliegenden Annahme, daß die Kernladung, die das 2s-Elektron "sieht", durch die zwei 1s-Elektronen vollständig um zwei Einheiten abgeschirmt wird.

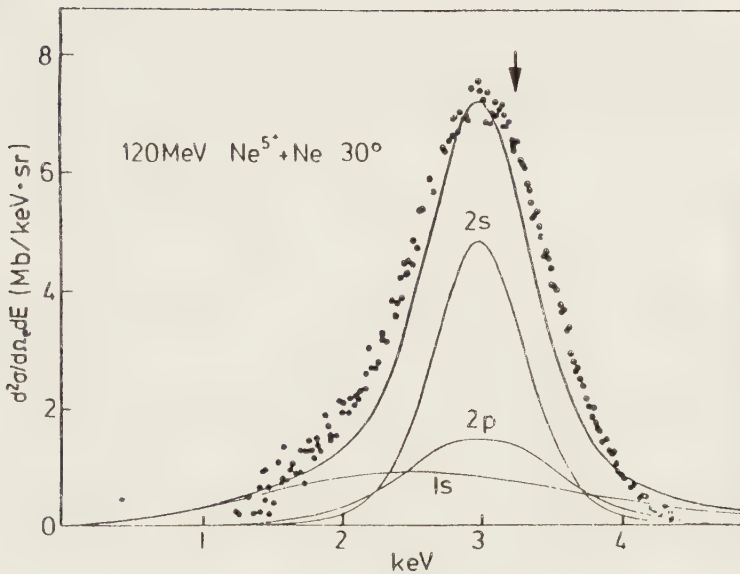


Abb.24 120 MeV Ne^{5+} ($1s^2 2s^2 2p^1$) + $\text{Ne}, 30^\circ$
 Experiment und Impulsnäherung mit
 neutralen Hartree-Fock Comptonprofilen

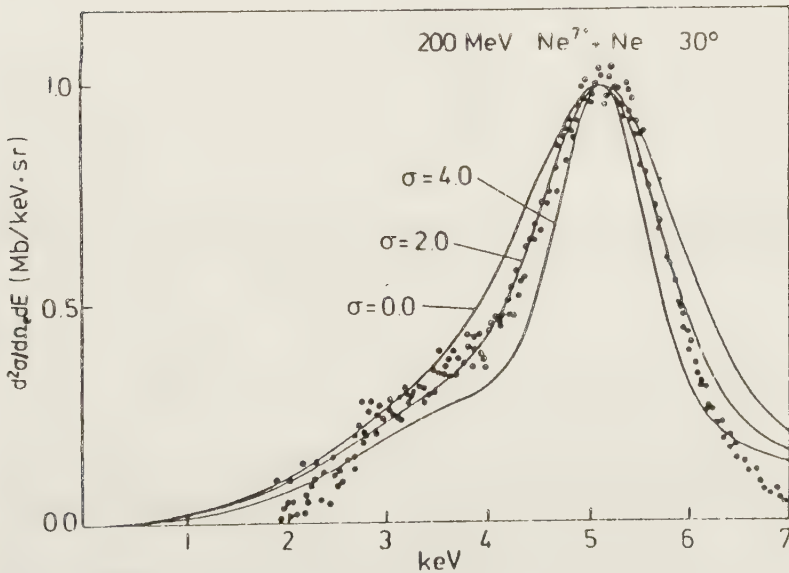


Abb.25 Theorie mit wasserstoffähnlichen Comptonprofilen,
 sonst wie Abb.23

Wie beim BSM für Targetelektronen erhält man auch hier größere Diskrepanzen, wenn man die Kernladungszahl des beim Stoß ionisierten Atoms, bzw. Ions, erhöht. Dies verdeutlicht Abb. 26 anhand des Systems 105 MeV Ar^{6+} auf Ne bei $\theta_e = 30^\circ$.

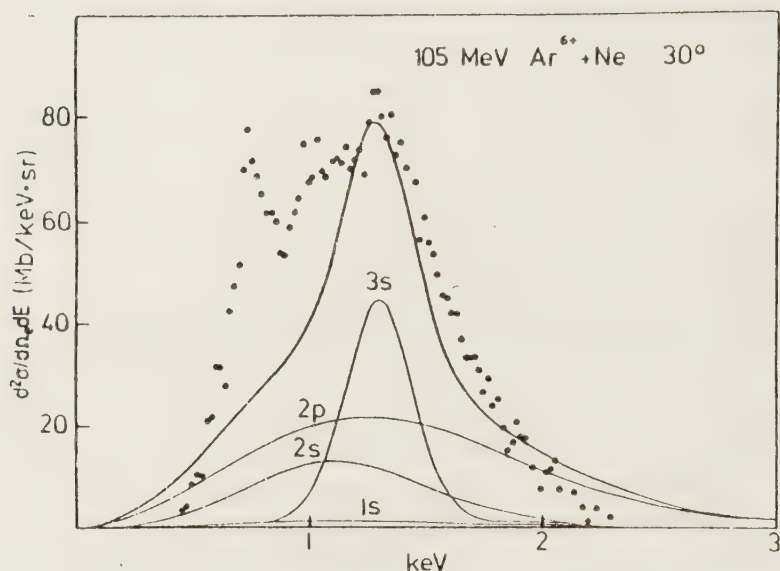


Abb. 26 105 MeV Ar^{6+} + Ne, 30°
Experiment und Theorie mit neutralen
Hartree-Fock Comptonprofilen

Die Strukturen auf der niederenergetischen Seite sind auf Augerelektronen des Ne-Atoms zurückzuführen.

4.2 Festkörpercomptonprofile

Um systematische Meßfehler (Energieeichung, Transmission des Spektrometers, Cupintegration) zu verringern, wurden die gemessenen zweifach differentiellen Wirkungsquerschnitte für 22 MeV p auf C, Al, Ti, Cu, Ag mit einem Normierungsfaktor und

einer konstanten Energieverschiebung versehen und so nach einer least-square-Fitprozedur den theoretischen Kurven angepaßt. Dies ist angesichts der Normierungseigenschaft der Comptonprofile gerechtfertigt. Es ergaben sich Normierungsfaktoren zwischen 0.5 und 1.5 und Energieverschiebungen zwischen -1 keV und + 1 keV. Der Nachweis von Comptondefekten war damit nicht möglich, auch die relativistische Verschiebung von 0.5 keV nach höheren Energien lag noch innerhalb der experimentellen Streuungen. Die theoretischen Kurven wurden nach der Impulsnäherung berechnet. Die Corezustände wurden dabei durch Hartree-Fock Comptonprofile beschrieben und die Valenzcomptonprofile experimentellen Ergebnissen der Comptonstreuung entnommen (vgl. Kap.2.2.3.). Die Ergebnisse für $\theta_0=0^0$ sind in den Abb. 27 bis 31 dargestellt. Bei allen folgenden Vergleichen zwischen Experiment und Theorie beziehen sich die Einheiten der Achsen auf die theoretischen Querschnitte.

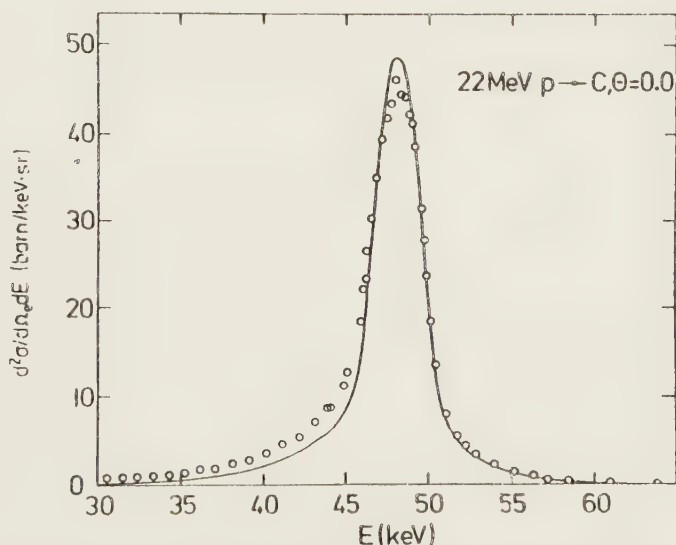
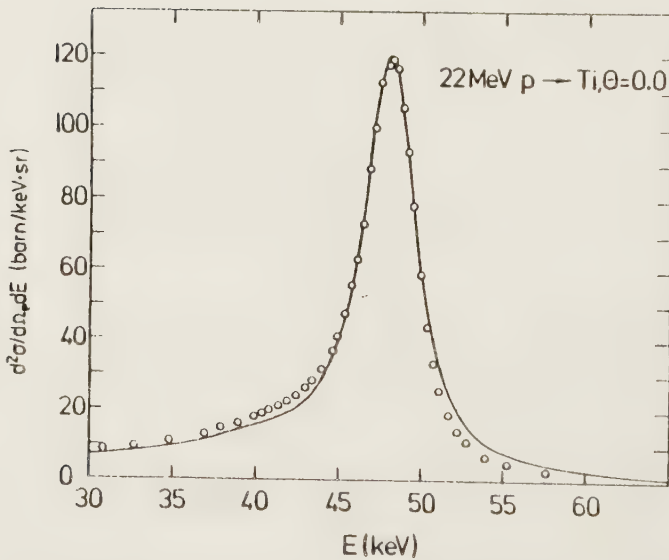
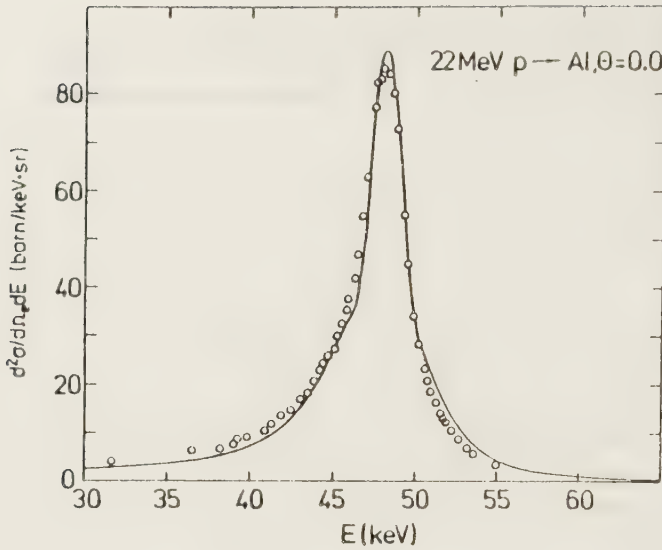
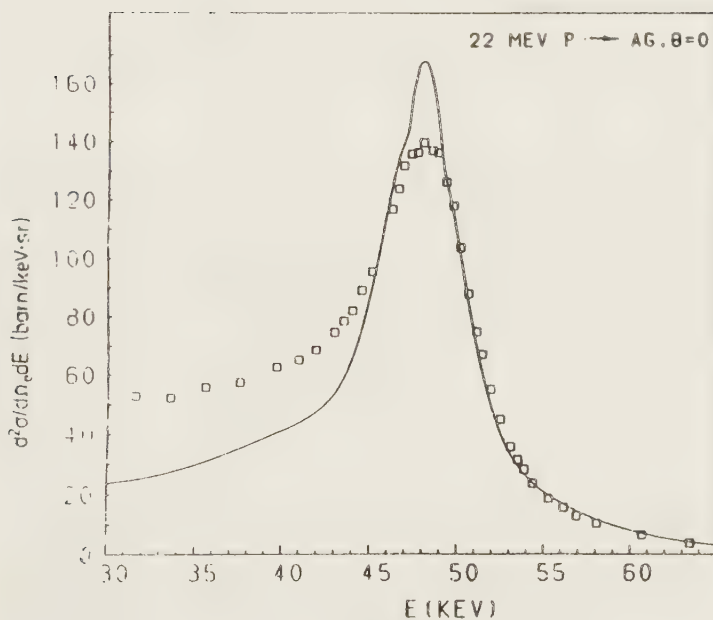
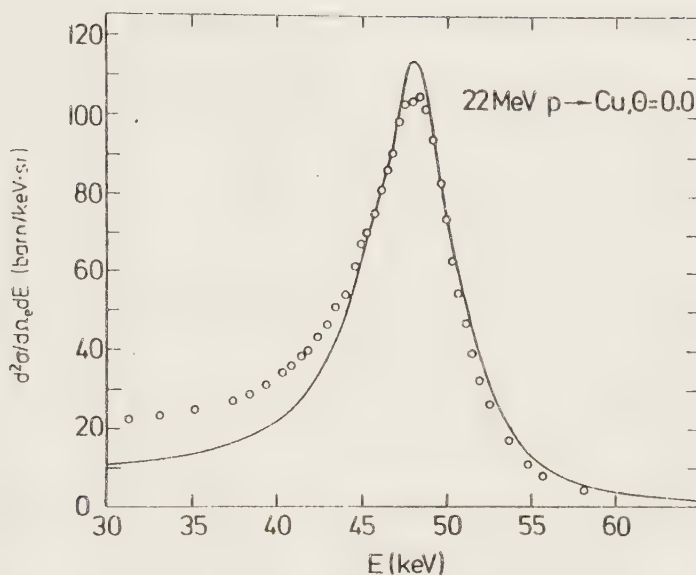


Abb.27 22 MeV p + C, 0^0 , Vergleich mit Impulsnäherung

Abb. 28, 29 22 MeV $p + \text{Al, Ti}, 0^\circ$

Vergleich mit der Impulsnäherung

Abb.30,31 22 MeV p + Cu, Ag, 0^0

Vergleich mit der Impulsnäherung

Analog zu den Ergebnissen in Kap.4.1.1 beobachtet man mit wachsender Kernladungszahl eine steigende Asymmetrie des Linienprofils infolge der verschiedenen Bindungsenergien der einzelnen Schalen. Während beim Kohlenstoff die Valenzelektronen das BSM dominieren, geht deren Beitrag mit wachsendem Z zurück; bei Kupfer und Silber sind Valenz- und Corebeitrag etwa gleich, wenn man die äußerste d-Schale zu den Valenzelektronen hinzurechnet. Der Übergang zwischen Valenz- und Core-Comptonprofil ist beim Al auch experimentell deutlich zu sehen. Das Valenzcomptonprofil wird hier in guter Näherung durch eine Parabel (freies Elektronengas) beschrieben. Die erhebliche Verbreiterung des Cu- und Ag-Comptonprofils gegenüber den anderen geht vor allem auf die gefüllte d- bzw. f-Schale zurück.

Bei kleineren Kernladungszahlen besteht im wesentlichen Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment, bei Cu und Ag ergeben sich jedoch deutliche Abweichungen, vor allem bei kleinen Energien. Man erkennt bei den meisten Targets qualitativ gleiche Diskrepanzen: die experimentellen Wirkungsquerschnitte sind auf der niederenergetischen Seite zu groß, im Maximum und auf der hochenergetischen Seite zu klein.

Abb.32 und 33 zeigen das BSM von Aluminium für $\theta_e = 30^\circ$ und $\theta_e = 45^\circ$. Das BSM verschiebt sich bei etwa konstanter Breite (anderer Energiemaßstab) zu kleineren Energien, während die Wirkungsquerschnitte wegen des Rutherfordfaktors q^{-4} stark anwachsen. Es ergeben sich wesentlich größere Abweichungen zwischen Theorie und Experiment als bei $\theta_e = 0^\circ$ und auf der hochenergetischen Seite mit anderem Vorzeichen.

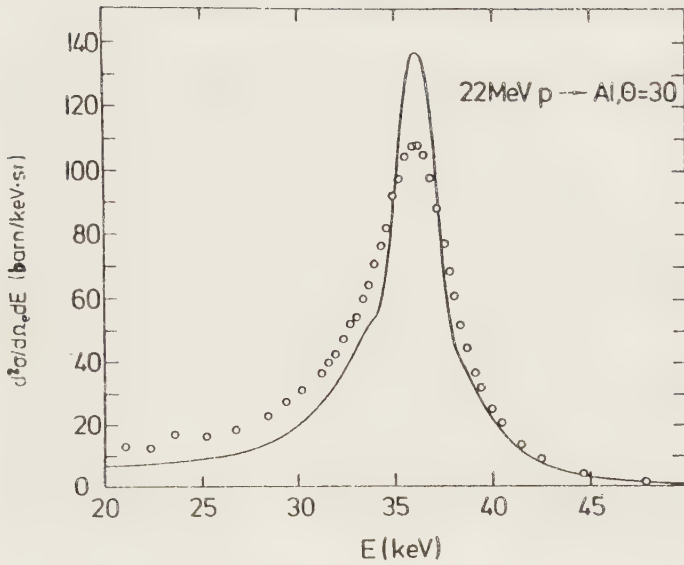


Abb.32 22 MeV p + Al, 30°
Vergleich mit der Impulsnäherung

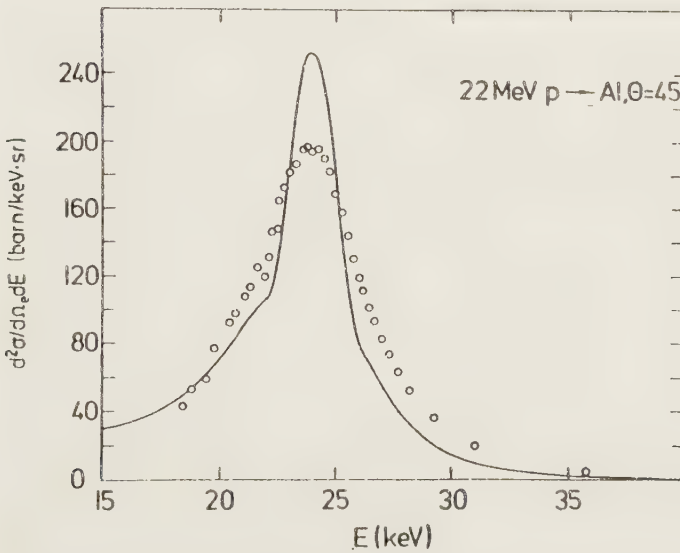


Abb.33 22 MeV p + Al, 45°
Vergleich mit der Impulsnäherung

4.3 Elastische Elektronenstreuung

Diese Abweichungen können zumindest qualitativ durch elastische Streuung der Elektronen im Target erklärt werden. Die Elektronen werden in den vorliegenden Experimenten im Mittel zwischen 1 und 10 mal gestreut, es liegt somit Mehrfachstreuung vor. Da die zu einer festen Elektronenenergie E gehörige Winkelverteilung besonders im Fall $E < 2v^2$ ein schmales Maximum (Breite in der Größenordnung 10^0) aufweist, wird diese und damit indirekt auch die Energieverteilung bei festem Winkel schon durch Streuung um einige Grad merklich beeinflusst. Der Energieverlust der Elektronen im Target ist dagegen vernachlässigbar: wenn man berücksichtigt, daß die Elektronen im Mittel nur die halbe Targetdicke durchlaufen, erhält man in allen Experimenten dieser Arbeit einen Energieverlust kleiner als 0.2 keV, wie aus (PB72) zu entnehmen ist.

4.3.1 Qualitative Betrachtungen

Der Einfluß der elastischen Elektronenstreuung auf die Energieverteilung kann anhand der Abb.1 oder Abb.7 veranschaulicht werden, wobei jeweils nur der dem BSM für Targetelektronen zugehörige Kreis zu betrachten ist. Der Energieachse entspricht eine gerade, durch den Ursprung gehende Linie mit einem Beobachtungswinkel θ zur v -Achse. Von dieser Linie aus wird die Elektronenintensität durch die Streuung nach beiden Seiten verteilt. In jedem Fall wird so das Maximum der Energieverteilung gesenkt, während die Flanken je nach dem Wert von θ angehoben oder gesenkt werden.

Zunächst sei $\theta = 0^0$ angenommen. Bei einer Energie $E < E_{\max}$ hat die zugehörige Winkelverteilung ein Maximum bei $\theta_0 = \arccos^{1/2}(E/E_{\max})$. Von diesem Maximum wird im allgemeinen mehr Intensität nach $\theta = 0^0$ gestreut als von $\theta = 0^0$ weg. Für $E \geq E_{\max}$ liegt das Maximum der Winkelverteilung bei 0^0 , daher kann nur Intensität von 0^0 weggestreut werden. Die nieder-

energetische Seite des BSM wird also angehoben, die hochenergetische Seite und das Maximum gesenkt. Letzteres macht sich weniger stark bemerkbar, da die Breite der Winkelverteilung mit zunehmender korrespondierender Energie anwächst und der Streuquerschnitt abnimmt.

Wenn $\theta > 0^\circ$, so weist die zu $E < E_{\max}$ gehörige Winkelverteilung ein Maximum bei einem Winkel $\theta_e > \theta$ und die zu $E > E_{\max}$ gehörige Winkelverteilung ein Maximum bei $\theta_e < \theta$ auf. In beiden Fällen wird von den Maxima mehr Intensität nach θ gestreut als von θ weg. Wenn $E = E_{\max}$, so gilt auch $\theta = \theta_e$, es kann also nur Intensität von θ weggestreut werden. Das Maximum des BSM wird also abgesenkt und die Flanken angehoben, d.h. das BSM wird verbreitert. Aus kinematischen Gründen ist die Winkelverteilung für $\theta_e > 0^\circ$ schmaler als für $\theta_e = 0^\circ$, daher ist hier ein größerer Effekt zu erwarten.

4.3.2 Wirkungsquerschnitte für Einfachstreuung

Der wesentliche Winkelbereich wird einerseits durch die Winkelauflösung, andererseits durch die Breite der Winkelverteilungen bestimmt und dürfte sich etwa von 1° bis 30° erstrecken. Für kleine Streuwinkel versagt die Rutherford-Streuformel, auch die Berücksichtigung der Abschirmung durch einen Thomas-Fermi Abschirmparameter ist für Winkel nahe 1° nicht sehr genau. Genauere Rechnungen wurden von Riley (RC75) durchgeführt und in Form einer Fitformel

$$(42) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{i=0}^4 A_i (1 - \cos \theta + 2B)^{-1} + \sum_{n=0}^6 C_n P_n(\cos \theta)$$

mit den Parametern A_i, B, C_n veröffentlicht. P_n bezeichnet das Legendre-Polynom. Die abschirmenden Elektronen wurden hierbei durch Hartree-Fock Wellenfunktionen beschrieben, die Dirac-Gleichung für die Streuung an dem daraus resultierenden elektrostatischen Potential wurde durch Partialwellenanalyse gelöst. Die Fitformel ermöglicht es, die später notwendige Azimutintegration bei der Faltung der Winkelverteilungen analytisch auszuführen. Bei Streuwinkeln $\theta < 1^\circ$ dominiert die

inelastische Streuung für Energieverluste von einigen eV (LE54), bei noch kleineren Winkeln auch Streuung durch Plasmaanregung (RA80), wie Abb.34 zeigt. Die Plasmaanregung ist hier ohne Bedeutung, die inelastische Streuung liefert bei den kleinsten noch relevanten Winkeln einen kleinen Beitrag, wurde in dieser Arbeit aber vernachlässigt.

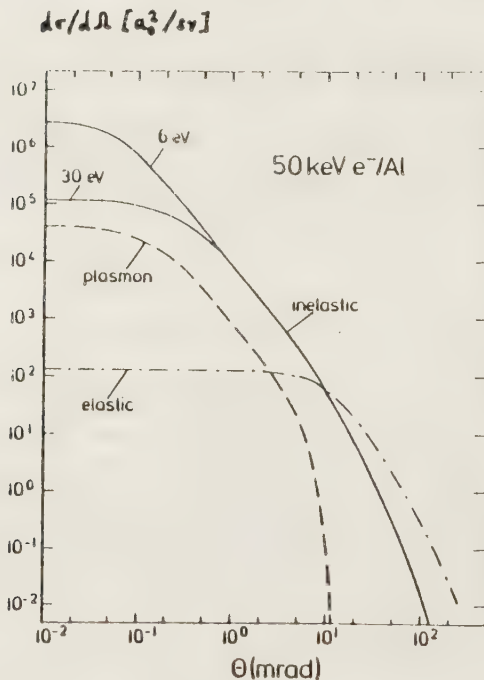


Abb.34 Querschnitte für die Streuung von 50 keV-Elektronen an Al in Abhängigkeit vom Streuwinkel (LE54)

Tabelle 4 : Streuquerschnitte in verschiedenen Näherungen
und Beitrag der inelastischen Streuung
für 50 keV-Elektronen an Al (a_0^2/sr)

Streuwinkel	0	0.5	1	2	5	10	30	total
Rutherford	∞	8600	540	34	0.86	0.54	7.0E-4	∞
Rutherford abgeschirmt	13	12	10	5.0	0.55	0.048	6.9E-4	0.08
Riley inelastisch	150	92	35	6.3	0.52	0.047	7.5E-4	0.16
E=30 eV	1.2E5	90	10	1.3	0.04			0.31
E= 6 eV	2.7E6	90	10	1.3	0.04			0.46
Plasmaanr.	4.2E4							0.03

Der totale Querschnitt für inelastische Streuung ist trotz des hohen differentiellen Querschnitts bei kleinen Winkeln von derselben Größenordnung wie der elastische, daher dürfte auch bei Mehrfachstreuung der Einfluß der inelastischen Streuung vernachlässigbar sein. Für größere Kernladungen geht der Beitrag der inelastischen Streuung weiter zurück: es gilt näherungsweise $\sigma_{\text{inel}}/\sigma_{\text{el}} = 26/Z$ (RE84).

4.3.3 Mehrfachstreuung und Korrektur

Das Target wird nun in n Schichten der Dicke x aufgeteilt. Die Dicke des Targets sei d , die Atomdichte N . Bezeichnet man die Winkelverteilung in der Tiefe x mit $I_x(\theta)$, so ergibt sich die Winkelverteilung in der nächsten Schicht $I_{x+\Delta x}(\theta)$ wie folgt:

$$(43) \quad I_{X+\Delta X}(\theta) = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{\pi} \sin \theta' d\theta' \frac{d\sigma}{d\Omega}(\cos \hat{\theta}) \frac{N \Delta x}{\cos \theta} I_X(\theta') \\ + \left(1 - \frac{\sigma N \Delta x}{\cos \theta}\right) I_X(\theta)$$

$$\text{mit } \cos \hat{\theta} = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \varphi'$$

Der erste Term beschreibt die gestreute Intensität durch eine Faltung der ursprünglichen Intensität mit dem Streuquerschnitt und der zweite Term die ungestreute Intensität. Die Winkelabhängigkeit der Weglänge wurde in beiden Termen durch einen Faktor $\cos^{-1}(\theta)$ berücksichtigt. Der Einfluß der Rückwärtsstreuung wird durch Gl.(43) natürlich nicht beschrieben, kann aber wegen der kleinen Streuquerschnitte vernachlässigt werden. Die φ' -Integration wurde analytisch, die θ' -Integration numerisch nach der Trapezregel mit einer Schrittweite von 1° durchgeführt. Im Intervall $\theta - 5^\circ < \theta' < \theta + 5^\circ$ wurde wegen des schmalen Maximums des Streuquerschnitts bei $\theta = \theta'$ eine kleinere Schrittweite von 0.1° gewählt. Durch Definition eines Streuoperators F

$$(44) \quad F I_X = \int d\Omega' K(\theta, \theta') I_X(\theta')$$

mit dem Kern

$$K(\theta, \theta') = \cos^{-1}(\theta') \left(\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\cos \hat{\theta}) - \frac{\delta(\theta - \theta')}{2\pi \sin \theta} \right)$$

kann Gl.(43) vereinfacht dargestellt werden:

$$(45) \quad I_{X+\Delta X} = (1 + \sigma N \Delta x F) I_X$$

Die Streuung durch das gesamte Target ergibt sich durch eine n-fache Faltung:

$$(46) \quad I_d = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + n \frac{d}{n} F)^n I_0 = e^{mF} I_0 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{m^i}{i!} F^i I_0.$$

$m = N \cdot d$ ist die mittlere Streuzahl. Aus numerischen Gründen empfiehlt es sich, m durch $m = m / \cos(\theta)$ und K durch $K \cdot \cos(\theta)$ zu ersetzen und außerdem die obere Integrationsgrenze in Gl. (43) etwas kleiner als $\pi/2$ zu wählen.

Da die Elektronen mit gleicher Wahrscheinlichkeit überall im Target erzeugt werden, muß man Gl. (46) noch über alle effektiven Targetdicken d' integrieren:

$$(47) \quad \hat{I}_d = \frac{1}{d} \int_0^d dd' I_{d'} = \frac{1}{m} \int_0^m dm' e^{m'F} I_0 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{m^i}{(i+1)!} F^i I_0.$$

Gl. (46) wird in der Literatur (KZ60, GS40, MO48) üblicherweise in der Form

$$(48) \quad I_d = e^{-m} e^{m(F+1)} I_0 = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-m} \frac{m^i}{i!} (F+1)^i I_0$$

geschrieben. Der Streuoperator beschreibt dann nur die gestreute Intensität und der Vorfaktor von $(F+1)^i$ die Wahrscheinlichkeit, daß das Elektron i -mal gestreut wird (Poissonverteilung). Die Winkelabhängigkeit der Weglänge wird dabei jedoch nicht berücksichtigt und die Mittelung über die effektiven Targetdicken etwas erschwert. Andererseits ist Gl. (48) für die numerische Auswertung bei sehr vielen Faltungen günstiger.

Bei festgehaltenem Beobachtungswinkel θ wurde nun für etwa 60 Energien im Bereich des BSM $\hat{I}_d$ durch wiederholte Faltung der theoretischen Winkelverteilung I_0 ermittelt und der Faktor $R = I_0(E, \theta) / \hat{I}_d(E, \theta)$ gebildet. Die experimentellen Daten wurden dann durch Multiplikation mit diesem Faktor korrigiert. Die Reihenentwicklung in Gl. (47) konvergierte für $m < 10$ und $\theta \leq 45^\circ$ hinreichend schnell, es waren im ungünstigsten Fall 20 Faltungen erforderlich. Die Berechnung

der Streukorrektur für eine Energieverteilung erforderte an der CYBER etwa 350 CPU-Sekunden, wobei die Berechnung der Streuquerschnitte auf allen Stützpunkten und die Faltungen je etwa die Hälfte der Zeit in Anspruch nahmen. Mit nur wenig größerem Rechenzeitaufwand kann eine Streukorrektur aber auch simultan für mehrere Targetdicken und Beobachtungswinkel vorgenommen werden.

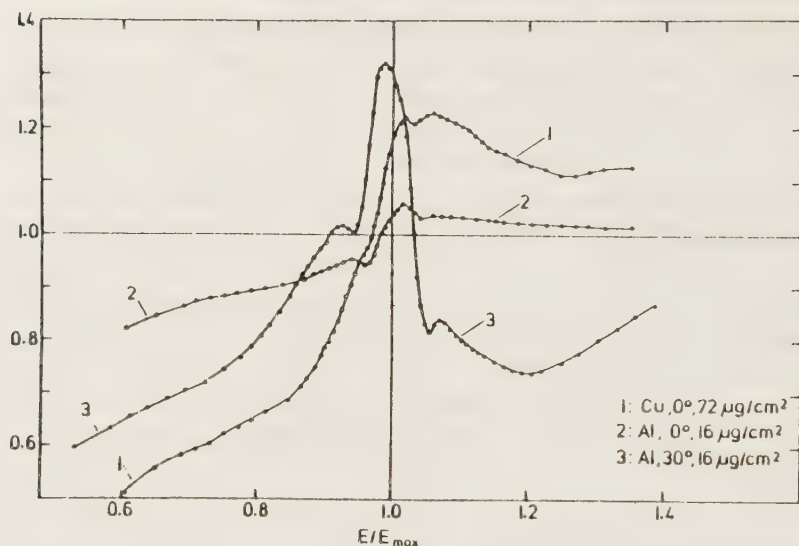


Abb.35 Korrekturfaktor R für verschiedene Targets und Winkel

Abb.35 zeigt den Verlauf des Korrekturfaktors für Cu, 0°, 72 µg/cm² und für Al, 0° bzw. 45°, 16 µg/cm². Das unterschiedliche Verhalten für $\theta = 0^\circ$ und $\theta > 0^\circ$ sowie die starke Zunahme der Streuung bei steigender Kernladungszahl und steigendem Winkel wird deutlich. Die kleinen Buckel in den Kurven sind auf Strukturen in den theoretischen Winkelverteilungen zurückzuführen, die auf den einzelnen gegeneinander verschobenen Schalenbeiträgen beruhen. Diese Strukturen werden durch die Streuung geglättet und im Korrekturfaktor besonders hervorgehoben. Die Abhängigkeit des Korrekturfaktors von der

Targetdicke ist wegen der mehrfachen Streuung nichtlinear: der Korrekturfaktor wächst schwächer als linear mit der Dicke an, da die Wirkung der Faltungen wegen der wachsenden Isotropie der Winkelverteilungen mit zunehmender Zahl der Faltungen abnimmt. Der Korrekturfaktor kann aus mehreren Gründen fehlerhaft sein: ungenaue Targetdicke, Fehler bei den Einzelquerschnitten und Fehler beim Korrekturverfahren. Der relative Fehler der Targetdicke läßt sich zu etwa 5% abschätzen, der daraus resultierende relative Fehler von R ist in jedem Fall kleiner als 3%, wie Abb. 36 zeigt, und damit vernachlässigbar. In derselben Weise wirkt sich ein Fehler des totalen Streuquerschnitts aus, der in derselben Größenordnung liegen dürfte, aber stark von Energie und Element abhängt (RC75). Der Fehler des Verfahrens ist, solange der Korrekturfaktor nicht zu stark von 1 abweicht, klein gegenüber der Korrektur selbst.

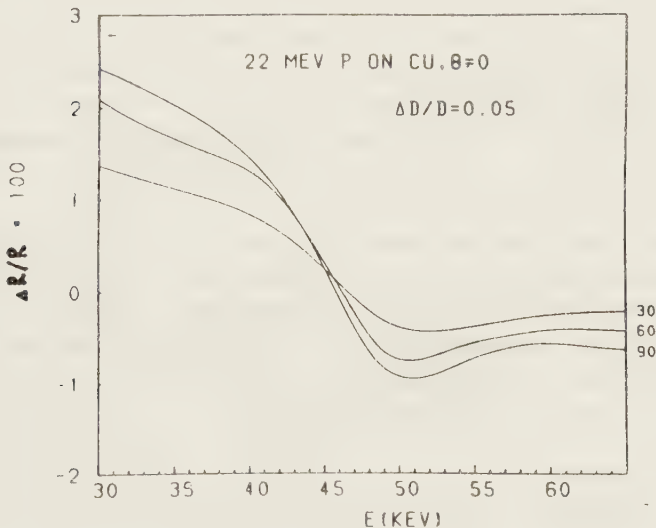


Abb. 36 Fehler des Korrekturfaktors als Funktion der Energie. Die Zahlen am rechten Rand geben die Targetdicke in $\mu\text{g/cm}^2$ an. Der Fehler $\Delta D/D$ der Targetdicke ist 5%.

Die um die elastische Streuung korrigierten Spektren sind in den Abbildungen 37-43 dargestellt, zusätzlich sind Corebeiträge (gestrichelte Linie) und Valenzbeiträge (strichpunktiierte Linie) eingezeichnet. Während sich die Mehrfachstreuung bei C und Al (0^0) kaum bemerkbar macht, stimmen bei Ti und insbesondere bei Cu und Ag die korrigierten Meßwerte deutlich besser mit der Theorie überein als die nicht korrigierten. Verbleibende Diskrepanzen resultieren aus Meßfehlern, schlechter Energieauflösung und Ungenauigkeit der Impulsnäherung. Die systematischen Abweichungen auf der hochenergetischen Seite des BSM deuten auf einen Zusammenbruch der Impulsnäherung für die inneren Schalen hin (vgl. Kap.2.3.1). Beim Ag war möglicherweise auch das Modell für das Valenzcomptonprofil (atomares 4d-Comptonprofil und freies Elektronengas für das 5s-Elektron) zu ungenau. Ein Fehler der Targetdicke und damit der Korrektur reicht zur Erklärung der verbleibenden Diskrepanz nicht aus. Bei den Spektren zu Al, 30^0 und 45^0 werden die bei den nicht korrigierten Daten auftretenden Diskrepanzen fast vollständig beseitigt. Der niederenergetische Bereich bei Al, 45^0 ist sowohl für die Messung (Nutzspektrum nahe am Detektorrauschen) als auch für die Streukorrektur ungünstig wegen der hohen mittleren Streuzahl und numerischer Probleme angesichts des großen Emissionswinkels.

Um die Anwendbarkeit der Messungen für die Festkörperphysik zu zeigen, wurden bei Al und Ti die theoretischen Wirkungsquerschnitte der Core-Elektronen abgezogen und die Differenz in Comptonprofile umgerechnet (Abb.44,45). Die Bindungsenergieverschiebung der so erhaltenen experimentellen Valenzcomptonprofile wurde dabei vernachlässigt.

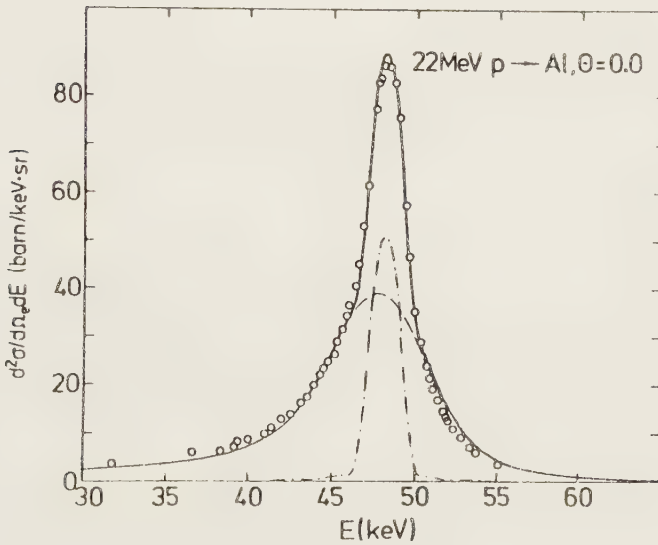
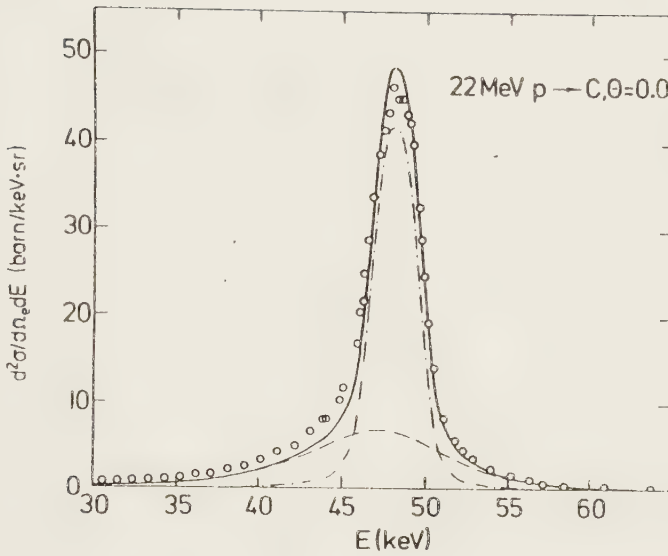


Abb. 37, 38 $22 \text{ MeV } p + C, Al, 0^\circ$, korrigiert
 gestrichelt: Corebeitrag
 strichpunktiert: Valenzbeitrag

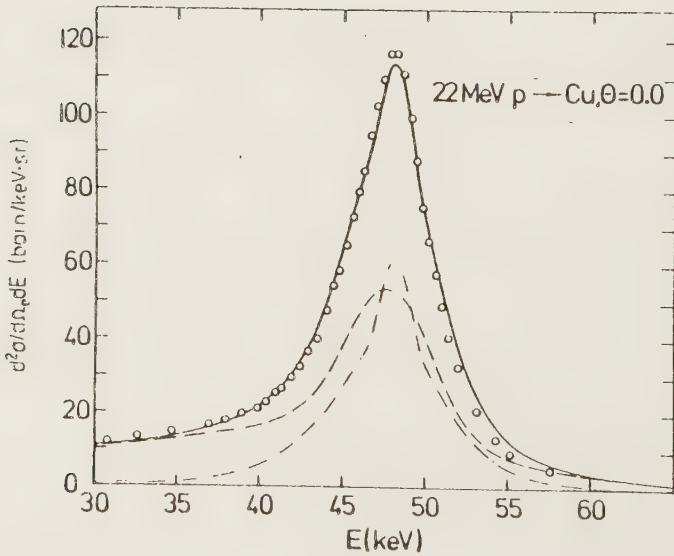
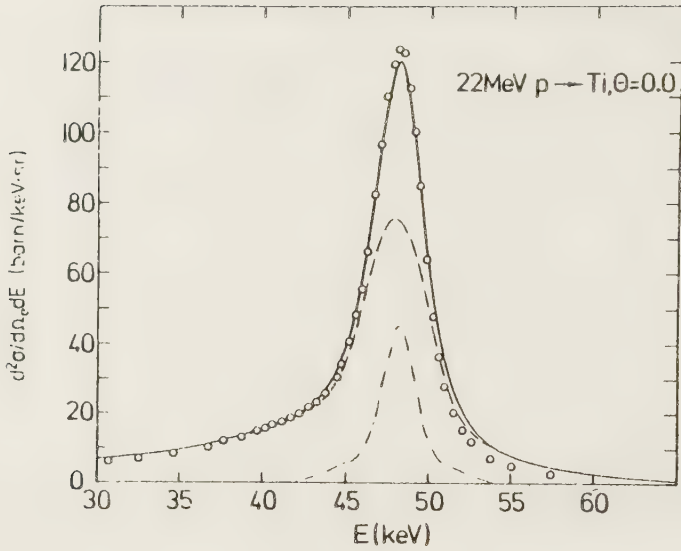


Abb.39,40 $22\text{ MeV } p + \text{Ti}, \text{Cu}, \text{O}^0$, korrigiert
gestrichelt: Corebeitrag
strichpunktiert: Valenzbeitrag

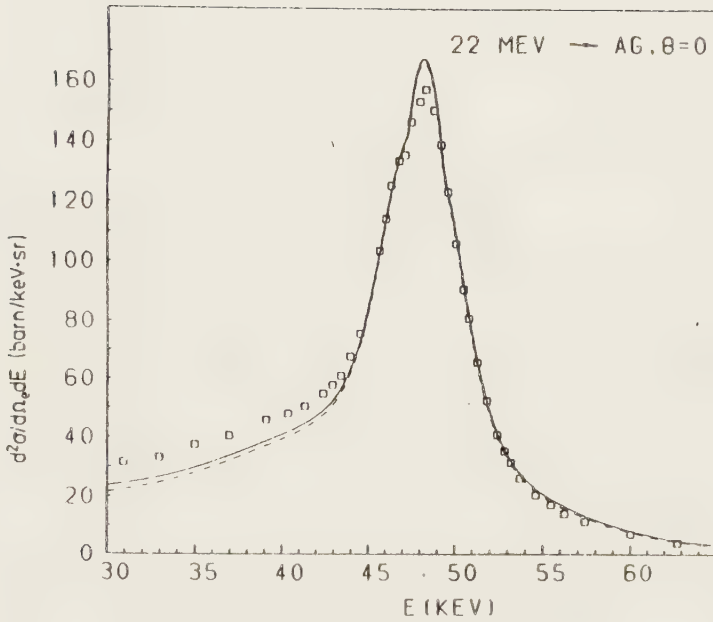


Abb.41 22 MeV P + Ag, 0° , korrigiert
 durchgezogene Linie: Impulsnäherung
 gestrichelte Linie: Bornsche Näherung für
 K- und L-Schale

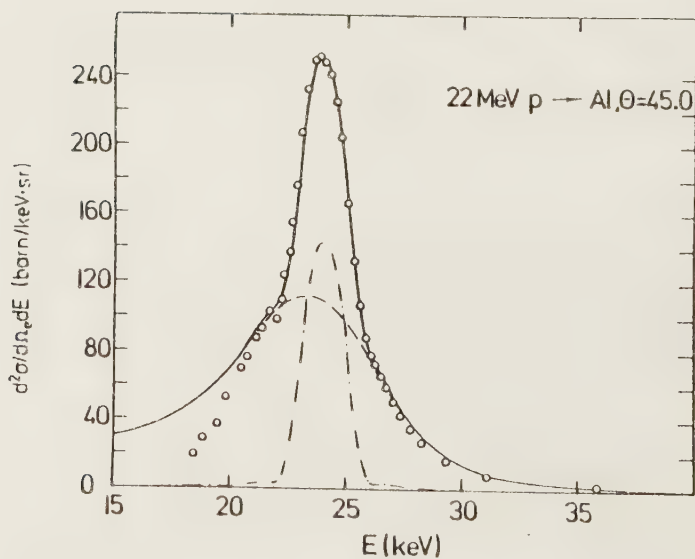
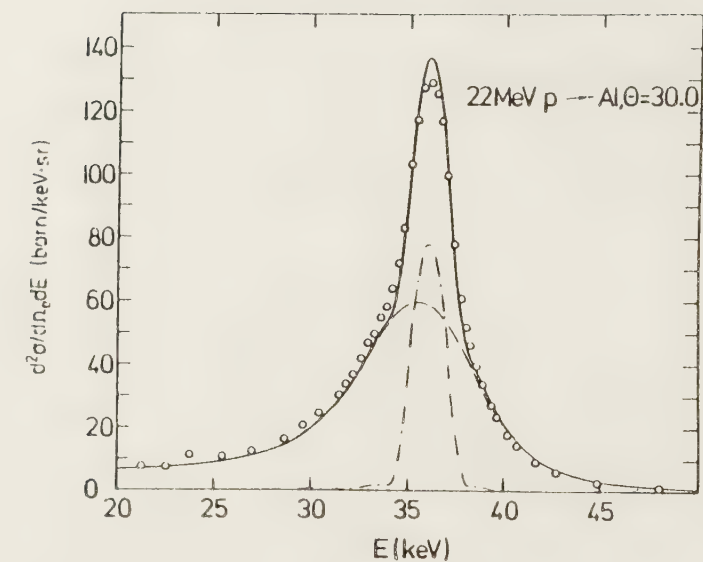


Abb. 42, 43 $22\text{ MeV } p + \text{Al}, 30^\circ, 45^\circ$, korrigiert
gestrichelt: Corebeitrag
strichpunktiert: Valenzbeitrag

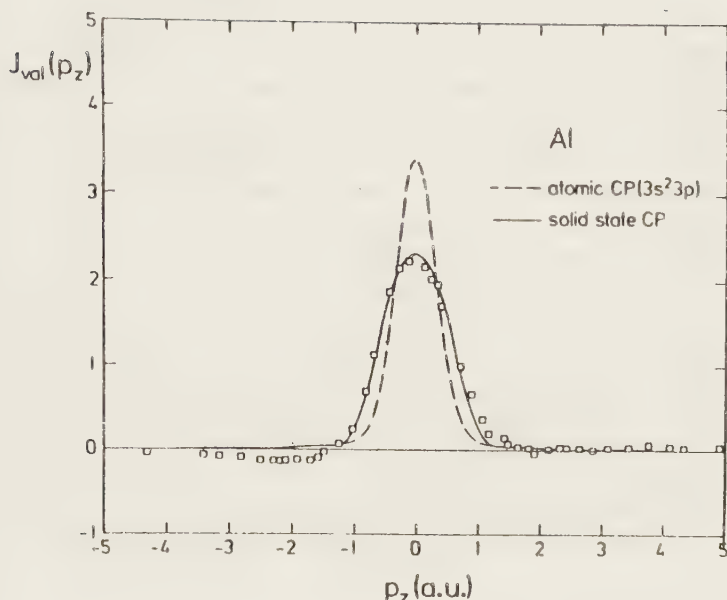


Abb.44 experimentelles Al-Valenz Comptonprofil
 durchgezogen:Festkörpercomptonprofil
 gestrichelt:atomares Comptonprofil

Die Meßgenauigkeit reicht insbesondere bei Ti wegen des relativ zum Core kleinen Valenzbeitrags offensichtlich nicht aus, um damit Festkörpermodelle testen zu können. Die Situation wäre bei Cu und Ag noch ungünstiger, insbesondere wenn man sich nur für das äußerste s-Elektron als Valenzelektron interessiert. Beim Silber beträgt der Anteil des Valenzcomptonprofils im Maximum nur noch 15% vom Gesamtcomptonprofil. Der Unterschied der Elektronenstruktur von Festkörpern und freien Atomen (gestrichelte Linie) wird durch das Experiment aber eindeutig wiedergegeben.

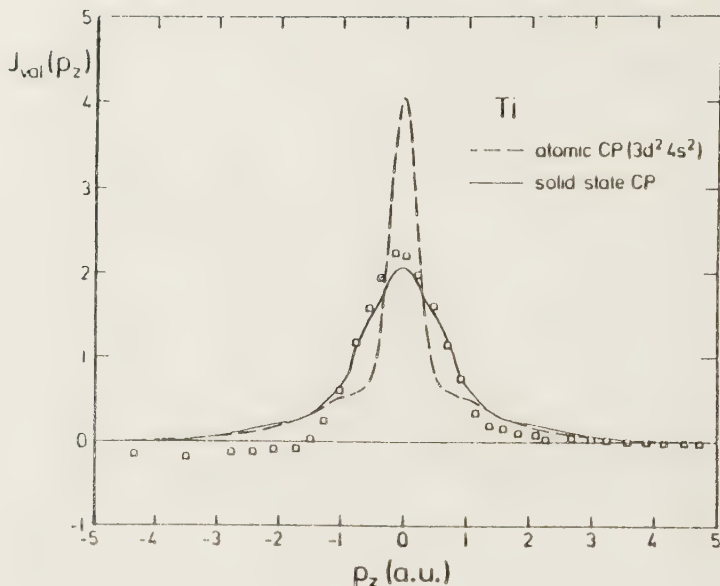


Abb.45 experimentelles Ti-Valenz Comptonprofil
 durchgezogen:Festkörpercomptonprofil
 gestrichelt:atomares Comptonprofil

Zusammenfassend kann man sagen, daß eine quantitative Mehrfachstreuokorrektur zweifach differentieller experimenteller Querschnitte im Bereich des BSM für 22 MeV Protonen und dünne Targets ($d < 100 \text{ ug/cm}^2$) bei kleinen Winkeln ($\theta_e \leq 45^\circ$) möglich ist. Die so korrigierten experimentellen Daten können im Rahmen der Meßgenauigkeit durch eine Impulsnäherung unter Verwendung von Festkörperncomptonprofilen (und nur solchen) weitgehend beschrieben werden. Wegen der starken Abhängigkeit der Mehrfachstreuokorrektur vom Emissionswinkel, zum Teil auch wegen des Einflusses der Winkelauflösung auf die Energieauflösung, empfiehlt sich zur Extraktion von Comptonprofilen aus dem BSM eine Messung bei $\theta_e = 0^\circ$.

4.4 Bornsche Näherung für die K- und L-Schale

Wie im letzten Kapitel erwähnt, deuten die korrigierten Meßergebnisse bei hohen Energien qualitativ auf ein Versagen der Impulsnäherung hin. Daher wurden die Wirkungsquerschnitte für die K- und L-Schale für die Elemente Ti, Cu und Ag, bei denen die Voraussetzungen für die Impulsnäherung nicht mehr gut erfüllt sind, in Bornscher Näherung gerechnet. Der inneren und äußeren Abschirmung der Wasserstoffwellenfunktionen wurde durch Verwendung einer effektiven Kernladung $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$ und einer experimentellen Bindungsenergie (BB67), welche die untere Integrationsgrenze q_{min} bestimmt, Rechnung getragen. Die effektive Kernladung ergab sich durch Anpassen wasserstoffähnlicher Comptonprofile an die sonst verwendeten Hartree-Fock Comptonprofile mit einem least-square-Fit. Die Ergebnisse weichen von den Werten der Slater-Abschirmung (SL30) etwas ab (Tabelle 5).

Tabelle 5 : Abschirmkonstanten σ für Bornsche
Näherung, in Klammern nach Slater (SL30)

	1s	2s	2p
Ti	0.71 (0.3)	4.47 (4.15)	4.96 (4.15)
Cu	0.74 (0.3)	4.79 (4.15)	5.19 (4.15)
Ag	-1.57 (0.3)	5.9 (4.15)	6.6 (4.15)

Die negative Abschirmung bei der K-Schale des Ag resultiert aus der Verwendung eines relativistischen Hartree-Fock Comptonprofils. Paßt man anstelle eines least-square-Fits einfach die Maxima der Comptonprofile aneinander an, so ergeben sich fast dieselben Werte (MB75). Das Ergebnis der Rechnungen für Ti, Cu, Ag ist in Abb. 46, 47, 41 dargestellt, die Bornsche Näherung ist gestrichelt eingezeichnet. Die theoretische Winkelverteilung für die Streukorrektur wurde aus Rechenzeitgründen der Impulsnäherung für alle Schalen entnommen. Man erhält eine leicht verbesserte Übereinstimmung zwischen theoretischen und experimentellen Resultaten, die

Korrektur durch die Bornsche Näherung ist jedoch zu klein und angesichts der Meßfehler auch kaum signifikant. Dies gilt auch für die leichteren Elemente.

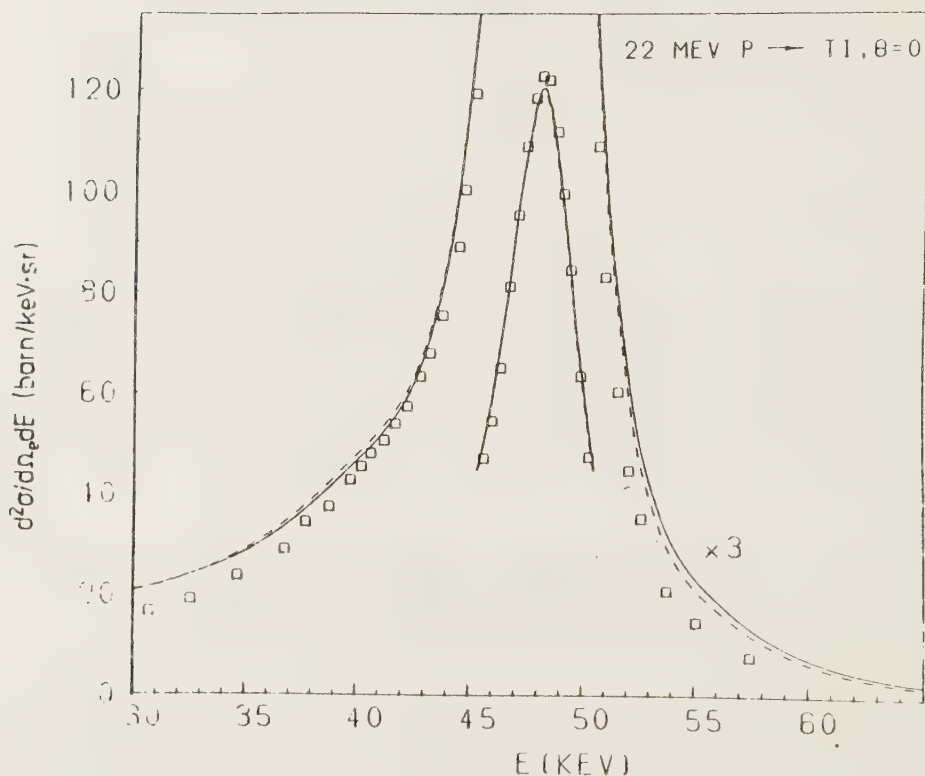


Abb.46 22 MeV p + Ti ,0°,korrigiert
gestrichelt:Bornsche Näherung für K+L-Schale
durchgezogen:Impulsnäherung

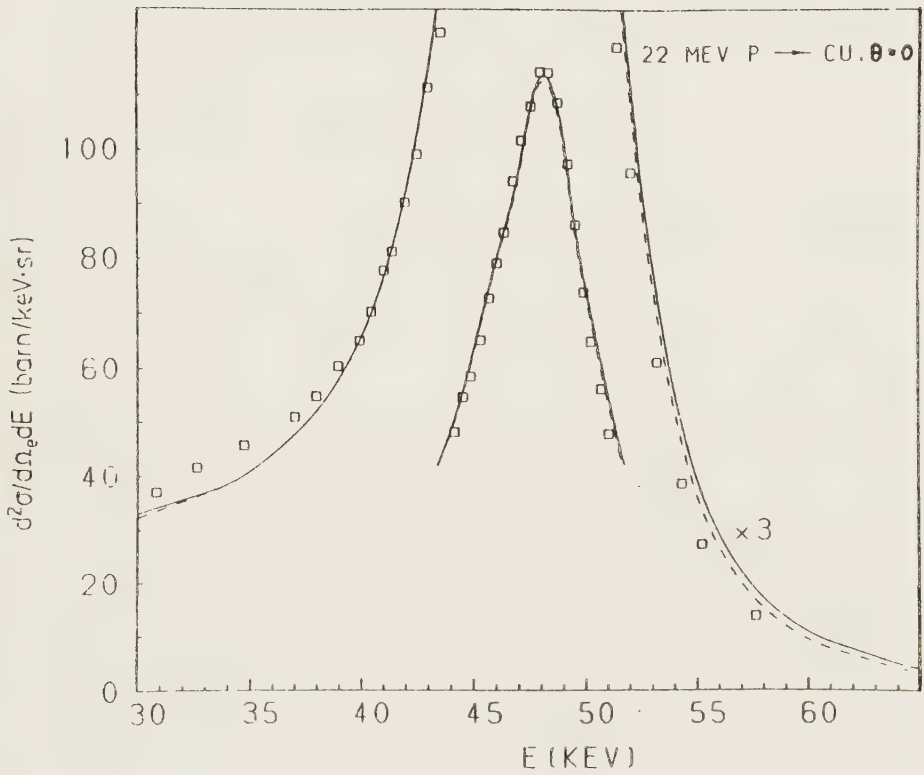


Abb.47 22 MeV p + Cu , 0° , korrigiert
 gestrichelt: Bornsche Näherung für K+L-Schale
 durchgezogen: Impulsnäherung

5. DISKUSSION

Es wurde gezeigt, daß durch inelastische Ion-Elektron Streuung Comptonprofile sowohl von Gasen als auch von Festkörpern gemessen werden können. Die gegenüber der Comptonstreuung und Elektron-Elektronstreuung unterschiedliche Kinematik führt zu einer Asymmetrie des Linienprofils, die auf verschiedene Bindungsenergien der einzelnen Schalen zurückgeht. Der Einfluß der elastischen Mehrfachstreuung auf die gemessenen Comptonprofile kann bei dünnen Targets ($d < 100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ bei 22 MeV Protonen) korrigiert werden. Die Mehrfachstreuung schränkt die Wahl der Targets ein, da solch dünne Folien nur aus wenigen Stoffen herstellbar sind. Eine Erhöhung der Protonenenergie würde hier Abhilfe schaffen. Bezeichnet man die Halbwertsbreite der BSM-Winkelverteilung mit H_{BSM} und die des elastischen Streuquerschnitts (abgeschirmte Rutherfordstreuung) mit H_{el} , so gilt $H_{\text{BSM}} \sim E^{-1/4}$ und $H_{\text{el}} \sim E^{-1/2}$, das BSM wird also weniger beeinflusst, da dessen Breite relativ schwächer abfällt. Ferner nimmt der totale Streuquerschnitt und damit die mittlere Streuzahl proportional v^{-2} ab. Eine höhere Protonenenergie ermöglicht insbesondere auch die Messung von Comptonprofilen mit hohen Kernladungszahlen und damit die Erschließung eines Bereichs, der der Comptonstreuung wegen der Absorption der Photonen bisher verschlossen war.

Die Anwendung der Ion-Elektron Streuung zur Messung von Comptonprofilen in der Festkörperphysik erfordert eine Verbesserung der Meßgenauigkeit und der Energieauflösung, insbesondere bei höherer Protonenenergie (Gl. 11). Die Meßgenauigkeit, die durch Strahlschwankungen beeinträchtigt wird, könnte durch automatisierte Meßverfahren, etwa durch Verwendung eines ortsempfindlichen Detektors oder Wobbeltechniken, verbessert werden. Durch Einbau einer Eintrittsblende und durch Vergrößerung des Bahnradius im Spektrometer ist eine erhebliche Verbesserung der Energieauflösung erreichbar. Die damit verbundene Reduzierung der Zählrate ist unproblematisch hinsichtlich der Meßzeit, jedoch muß dann auch der

Gammauntergrund in den Elektronenspektren besser unterdrückt werden.

LITERATUR

- (BA33) Barber, Proc. Leeds. Phil. Soc. 2 (1933) 427
- (BB67) J.A. Bearden, A.F. Burr, Rev. Mod. Phys. (1967) 128
- (BB83) F. Bell, H. Böckl, M.Z. Wu, H.D. Betz,
J. Phys. B16 (1983) 187
- (BB831) H. Böckl, F. Bell, Phys. Rev. A28 (1983) 3207
- (BB84) H. Böckl, F. Bell,
Nucl. Instr. and Meth. B2 (1984) 311
- (BE84) Dz Belkic, J. Phys. B :At. Mol. Phys. 17 (1984) 3629
- (BM74) B.J. Bloch, L.B. Mendelsohn,
Phys. Rev. A2 (1974) 129
- (BM75) F. Biggs, L.B. Mendelsohn, J.B. Mann, At. Data and
Nucl. Data Tables 16 (1975) 201
- (BS57) H.A. Bethe, E.E. Salpeter, Handbuch der Physik 35,
Springer-Verlag (1957) 88
- (BT73) R.A. Bonham, C. Tavad, J. Chem. Phys. 59 (1973) 4691
- (CI71) A.V. Creve, M. Isaacson, D. Johnson,
Rev. Sci. Instr. 42 (1971) 411
- (CN70) T.A. Carlson, C.W. Nestor, N. Wassermann, J.D. Dowell,
At. Data 2 (1970) 63
- (CR74) E. Clementi, C. Roetti,
At. Data and Nucl. Data Tables 14 (1974) 177
- (CT82) C. Dal Cappello, C. Tavad, A. Lahmann-Bennani,
Phys. Rev. A26 (1982) 2249
- (CW74) D.T. Cromer, J.T. Waber, International Tables for
X-Ray Crystallography (Kynoch, Birmingham, 1974)
- (DA81) M.H. Day, J. Phys. B:At. Mol. Phys. 14 (1981) 231
- (DM29) J.W.M. DuMond, Phys. Rev. 33 (1929) 643
- (EH53) H. Ewald, H. Hintenberger,
Methoden und Anwendungen der Massenspektroskopie,
(Verlag Chemie GMBH, Weinheim/Bergstraße, 1953)
- (EI70) P. Eisenberger, Phys. Rev. A2 (1970) 1678
- (EN67) H. Enge, Focusing of Charged Particles,
Herausgeber A. Septier (Academic Press, New York 1967)
Kapitel 4.2, 203
- (EP70) P. Eisenberger, P.M. Platzmann,
Phys. Rev. A2 (1970) 415
- (ER74) P. Eisenberger, W.A. Reed, Phys. Rev. B9 (1974) 3242

- (FP76) J. Felsteiner, P. Pattison,
Phys. Rev. B13 (1976) 2702
- (FS66) K. Fujiwara, O. Sueoka,
J. Phys. Soc. Japan 21 (1966) 1947
- (GS40) S. Goudsmith, J.L. Saunderson, Phys. Rev. 57
(1940) 24
- (HC73) S.T. Hood, I.E. McCarthy, P.J.O. Teubner,
E. Weigold, Phys. Rev. A8 (1973) 2494
- (IN71) M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. 43 (1971) 297
- (KE80) J. Kemmer, Nucl. Instr. and Meth. 169 (1980) 499
- (KI83) C.Kittel, Einführung in die Festkörperphysik
(Oldenburg Verlag, München 1983) 185
- (KJ63) C.E. Kuyatt, T. Jorgensen,
Phys. Rev. 130 (1963) 1444
- (KZ60) E. Keil, E. Zeitler, W. Zinn,
Z. Naturf. 15a (1960) 1031
- (JA80) D.H. Jakubassa, J. Phys. B13 (1980) 2099
- (JA83) D.H. Jakubassa, private Mitteilung
- (LE54) F. Lenz, Z. Naturf. 9a (1954) 185
- (LL79) L.D. Landau, E.M. Lifschitz,
Quantenmechanik, (Akademie-Verlag, 1979) 558
- (MB75) L.B. Mendelsohn, B.J. Bloch,
Phys. Rev. A12 (1975) 551
- (ML76) M. Mladjenovic,
Development of Magnetic - Ray Spectroscopy,
(Springer-Verlag, Berlin 1976)
- (MO30) N.F. Mott, Proc. Roy. Soc. A126 (1930) 259
- (MO48) G. Moliere, Z. Naturf. 3a (1948) 78
- (MP80) J.E. Miraglia, V.H. Ponce, J. Phys. B13 (1980) 1195
- (MT69) O.E. Mogensen, G. Trumpy, Phys. Rev. 188 (1969) 639
- (PB72) L. Pages, E. Bertel, H. Sklavenitis,
At. Data Tables 4 (1972) 1
- (PM74) P. Pattison, S. Manninen, J. Felsteiner, M. Cooper,
Phil. Mag. 30 (1974) 973
- (PO77) V.H. Ponce,
At. Data and Nucl. Data Tables 19 (1977) 63
- (PR76) J. Pajak, B. Rozenfeld, Acta Phys. Pol. A50 (1976)
611

- (PS83) M. Prost, D. Schneider, R. DuBois, P. Ziem,
H.C. Werner, N. Stolterfoht,
Phys. Rev. A28 (1983) 649
- (RA80) H. Raether, Excitation of plasmons and interband
transitions by electrons (Springer, Berlin, 1980) 26
- (RC75) M.E. Riley, C.J. Mac Callum, F. Biggs, At. Data and
Nucl. Data Tables 15 (1975) 443
erratum ibid 28 (1983) 379
- (RE74) W.A. Reed, P. Eisenberger, K.C. Pandey, L.C. Snyder,
Phys. Rev. B10 (1974) 1507
- (RE84) L. Reimer, Transmission Electron Microscopy,
(Springer, Berlin, 1984) 156
- (RM74) M.E. Rudd, J.M. Macek, Case Studies in Atomic
Physics (North-Holland, New York 1974) Vol. III, p. 49
- (RS66) M.E. Rudd, C.A. Sautter, C.L. Bailey, Phys. Rev. 151
(1966) 20
- (SC73) G. Schnell, Magnete (Karl Thieme, München 1973)
- (SI74) R.M. Singru, J. Phys. Chem. Solids 35 (1974) 33
- (SL30) J.C. Slater, Phys. Rev. 36 (1930) 57
- (SP79) E. Spindler, Doktorarbeit, Universität München (1979)
- (SS75) M. Schumacher, F. Smend, I. Borchert,
J. Phys. B8 (1975) 1428
- (ST34) W.E. Stephens, Phys. Rev. 45 (1934) 513
- (ST57) A.T. Stewart, Can. J. Phys. 35 (1957) 168
- (TW72) L.H. Toburen, W.E. Wilson, Phys. Rev. A5 (1972) 247
- (WI77) Compton Scattering, Herausgeber B.G. Williams,
Mc-Graw-Hill (1977)
- (WL75) T.C. Wong, L.B. Mendelsohn, H.F. Wellenstein,
R.A. Bonham, Phys. Rev. A12 (1975) 1846
- (WM82) T.C. Wong, L.B. Mendelsohn, H. Grossmann,
H.F. Wellenstein, Phys. Rev. A26 (1982) 181
- (WT83) B.G. Williams, J.M. Thomas,
Int. Rev. in Phys. Chem. 3 (1983) 39

HÄUFIG VERWENDETE ABKÜRZUNGEN

p_i, p_z	intrinsischer Impuls und dessen z-Komponente
$J(p_z)$	Comptonprofil
Z, Z_p	Kernladung des Targets und des Projektils
E_b	Betrag der Bindungsenergie
k, E	Impuls und Energie des Elektrons
$E_{\max}$	energetische Lage des binären Stoßmaximums
v	Projektilgeschwindigkeit
q, ϵ	Impulsübertrag und Energieübertrag
θ_e	Elektronenwinkel
M	Ionenmasse
$F(q)$	kohärenter Atomformfaktor
ψ_i, ψ_f	Wellenfunktion des gebundenen und freien Elektrons
r, g, b	Bahnradius, Gegenstandsweite, Bildweite
φ, α	Ablenkwinkel, Eintrittswinkel beim Spektrometer
$I_x(\theta)$	Winkelverteilung nach der Strecke x

Diese Arbeit war nur in Zusammenarbeit mit den Kollegen der Arbeitsgruppe Atomphysik der Sektion Physik in Garching und vielen Mitarbeitern des Beschleunigerlaboratoriums der Universität und der Technischen Universität München möglich. Ihnen allen, vor allem den Herren Prof. Dr. H.-D. Betz, Dr. J. Rothermel, Dipl. Phys. R. Spies, Dipl. Phys. R. Höppler und Frau M. Z. Wu sei für ihre Hilfe herzlich gedankt.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. F. Bell für die Überlassung des Themas, für die kontinuierliche Förderung und das stete Interesse am Fortgang der Arbeit. Frau Dr. D.H. Jakubassa möchte ich für viele anregende Diskussionen und wertvolle Unterstützung bei theoretischen Fragen danken.

Herrn Schuhmann danke ich für praktische Hilfe bei Konstruktionen und Zeichnungen, den Herren der Werkstatt für die sorgfältige Ausführung der mechanischen Arbeiten und Herrn Kemmer für die Überlassung einiger Detektoren.

LEBENS LAUF

Ich wurde am 23. Mai 1955 in München als 2. Kind des Feinmechanikers Hans Böckl und seiner Frau Margarethe, geb. Krippner, geboren.

Von 1961 bis 1965 besuchte ich die Volksschule am Mariahilfplatz in München, danach das Maria-Theresia Gymnasium in München, wo ich 1974 die Reifeprüfung ablegte.

Nach der Dienstzeit bei der Bundeswehr begann ich im Wintersemester 1975/76 an der Universität München das Studium der Physik. 1980 übernahm ich an der Sektion Physik der Universität München bei Prof. Dr. F. Bell eine experimentelle Diplomarbeit und schloß 1981 das Studium mit der Diplom-Hauptprüfung ab.

Seit Ende 1981 arbeite ich als Doktorand bei Prof. Dr. F. Bell an der Sektion Physik der Universität München.

